

**Sekundärelektronenemission
bei Oberflächengitterführung
leichter Ionen an Ni**

Hans Winter

Sekundärelektronenemission
bei Oberflächengitterführung
leichter Ionen an Ni

Dissertation
der Fakultät für Physik
der Ludwig – Maximilians – Universität München

vorgelegt von
Hans Winter
aus Traunreut

München, den 1. Oktober 1986

1.Gutachter: Prof. Dr. R. Sizmann

2.Gutachter: Prof. Dr. H. Bross

Tag der mündlichen Prüfung: 24.3.1987



drucken + binden
gmbh

Schellingstraße 23
8000 München 40

☎ 089/28 44 45

Inhaltsverzeichnis

1. Zusammenfassung.....	5
2. Einleitung.....	7
3. Experimentelle Durchführung.....	9
3.1. Beschleuniger, Vakuumsystem und Streukammer.....	9
3.2. Kristallpräparation.....	12
3.3. Meßanordnung und Meßgenauigkeiten.....	15
4. Ionengitterführung.....	23
4.1. Analytische Beschreibung.....	23
4.1.1. Grundlagen.....	23
4.1.2. Axiale und planare Oberflächengitterführung.....	25
4.1.3. Reaktionsausbeuten bei Gitterführung.....	28
4.2. Computersimulation.....	32
4.2.1. Berechnung der Projektiltrajektorien bei Gitter- führung : Streuebenenkonzept und Binärstöße.....	32
4.2.2. Energieverluste.....	38
4.2.3. Realistische Kristallsimulation.....	38
4.2.4. Start- und Abbruchbedingungen, ausgegebene Streudaten.....	40
5. Ioneninduzierte Sekundärelektronenemission.....	42
5.1. Allgemeines und theoretische Ansätze.....	42
5.2. Das freie Elektronengas als instruktives Beispiel....	48
5.3. Valenzelektronen und innere Schalen bei Ni.....	58
5.4. Zum Austritt produzierter Sekundärelektronen.....	62
5.5. Beschreibung von Sekundärelektronenproduktion und elektronischem Energieverlust in der Computer- simulation.....	66

6. Ioneninduzierte Sekundärelektronenemission an der sauberen Ni(110)-Oberfläche.....	72
6.1. $\text{He}^+(200\text{keV}) \rightarrow \text{Ni}(110), [\bar{1}\bar{1}0]$	72
6.1.1. Festlegung der Parameter.....	79
6.1.2. Ionenflußdichteverteilungen und Entstehungs- tiefeprofile.....	87
6.1.3. Einfluß von Oberflächenrauhigkeit, Temperatur und Elektronendichteausläufer.....	94
6.2. $\text{He}^+(200\text{keV}) \rightarrow \text{Ni}(110), [001]$ und $\text{He}^+(200\text{keV}) \rightarrow \text{Ni}(110), [\bar{1}\bar{1}2]$	98
6.3. SEE für verschiedene Einschußwinkel Φ	105
7. Ioneninduzierte Sekundärelektronenemission an sauerstoffbedeckten Ni-Oberflächen.....	117
7.1. Strukturmodelle der Ni(110)2×1-O und der Ni(001)c2×2-O-Oberfläche; Bedeckung der Oberflächen im Experiment.....	117
7.2. Einfluß von Bedeckung und Rekonstruktion auf die SEE; Möglichkeiten zur Struktur- und Positionsbestimmung.	119
7.3. Weitere Profile an Ni(110)2×1-O; planare Gitterführung bei Bedeckung.....	138
7.4. SEE als Funktion der Sauerstoff-Fluenz.....	143
8. Überblick.....	147
Anhang.....	151
Computerprogramm.....	159
Literatur.....	172
Dank.....	178
Lebenslauf.....	179

Literaturangaben sind in eckige Klammern gesetzt. Für mathematische Ausdrücke ist eine Numerierung in runden Klammern verwendet. Abbildungen werden ausdrücklich als solche angesprochen (Abbildung..., Abb. ...). Vektoren sind durch Fettdruck gekennzeichnet.

1. Zusammenfassung

Die Analyse der ioneninduzierten Sekundärelektronenemission (SEE) stellt, in Verbindung mit der Oberflächengitterführung, einen neuen Zugang zur Untersuchung der Oberflächengeometrie von Festkörpern dar. Ein H^+ - oder He^+ -Strahl kleiner Divergenz und einer Energie zwischen 75 und 200 keV fällt streifend mit $\Phi = 0,5^\circ - 2^\circ$ auf eine Ni-Einkristalloberfläche. Variiert wird der azimutale Einschubwinkel Θ , bezogen auf eine niederindizierte Oberflächenrichtung. Man mißt den positiven Probenstrom infolge der emittierten Elektronen und der auftreffenden Ionen, wobei der Ionenbeitrag unter den gewählten Einschubbedingungen vernachlässigbar ist. Untersucht wurden saubere, mit Sauerstoff bedeckte und rekonstruierte Oberflächen.

Bei Einschub längs einer niederindizierten Richtung ($\Theta = 0^\circ$, axiale Oberflächengitterführung) erreicht die SEE-Ausbeute γ ein Maximum $\gamma_{\max}$ gegenüber dem Wert γ_{ran} bei $\Theta = 5^\circ$. $\gamma_{\text{rel}} = \gamma_{\max} / \gamma_{\text{ran}}$ wächst mit sinkendem Φ an, z.B. für $H^+(100\text{keV}) \rightarrow \text{Ni}(110), [\bar{1}\bar{1}0]$: $\Phi = 2^\circ$: $\gamma_{\text{rel}} = 1,4$; $\Phi = 1^\circ$: $\gamma_{\text{rel}} = 1,7$; $\Phi = 0,5^\circ$: $\gamma_{\text{rel}} = 2,4$.

γ_{ran} beträgt z.B. für $H^+(100\text{keV}), \Phi = 1^\circ$ 34 ± 3 Elektronen/Ion und für $He^+(200\text{keV}), \Phi = 1^\circ$ 61 ± 3 Elektronen/Ion. Das Verhältnis beider Werte entspricht den unterschiedlichen elektronischen Energieverlusten dieser Projektile in Ni.

Von wesentlicher Bedeutung für die SEE ist die Reflexion der auf die Oberfläche treffenden Ionen. So setzt für $\Phi < \Phi_{\text{sp}}$, dem kritischen Winkel planarer Oberflächengitterführung, der SEE-Anstieg gerade beim Grenzwinkel $\Theta = \Theta_{\text{ap}}$ ein, bei dem die Spiegelreflexion aufhört und Teilchen in die Oberfläche eindringen. Θ_{ap} hängt von der Oberflächengeometrie ab. Strukturen der SEE-Maxima lassen sich durch erhöhte Teilchenreflexion infolge einer Fokussierung einfallender Projektile auf Atomketten der zweiten und dritten Atomlage unter der Oberfläche erklären. Diese Fokussierungsstrukturen konnten erstmals auch in der SEE beobachtet werden (z.B. längs $\text{Ni}(110), [\bar{1}\bar{1}0]$). Sie dürfen nicht mit ähnlichen Strukturen verwechselt werden, die durch planare

Gitterführung ins Volumen entstehen (z.B. längs $\text{Ni}(110), [1\bar{1}2]$). Durch Oberflächenrauigkeit geht die Reflexion drastisch zurück. Deshalb stellen γ_{rel} und die Fokussierungsstrukturen ein empfindliches Kriterium zur Beurteilung der Rauigkeit einer Oberfläche dar.

Der SEE-Anstieg bei Θ_{ap} und die Fokussierungsstrukturen sind durch Reflexion, also nur durch Merkmale des Ionenflusses, bestimmt. Dagegen hängt der Verlauf der SEE-Kurven für $|\Theta| < \Theta_{\text{ap}}$, wo Teilchen in die Oberfläche eindringen, auch von der räumlich inhomogenen Anregungswahrscheinlichkeit der Elektronen im Kristall ab. Das zeigen Computersimulationen mit veränderbarem stoßparameterabhängigen Modellwirkungsquerschnitt für die Elektronenproduktion. Quantitativ befriedigende Übereinstimmung zum Experiment tritt ein, wenn man ihn so wählt, daß die Elektronenproduktionsrate der Valenzelektronendichteverteilung folgt. Dies stellt eine neuartige Bestätigung der Theorie von Baragiola dar, der die SEE durch leichte schnelle Ionen als Folge direkter Stöße mit Valenzelektronen auffaßt. Die Erklärung der SEE durch Ionisation in tieferliegenden Schalen mit anschließender Auger-Rekombination (nach Parilis und Kishinevski) trifft für die untersuchten Systeme nicht zu.

Der Elektronenaustritt läßt sich durch eine effektive freie Weglänge $L = 1 \text{ nm}$ beschreiben. Die Oberflächenempfindlichkeit der Methode ist jedoch nicht durch L gegeben, sondern dadurch, daß der Kurvenverlauf durch die Teilchenreflexion an obersten Atomketten mitbestimmt wird.

Bedeckung oder Rekonstruktion der Oberflächen führt nur dann zu charakteristischen Änderungen der SEE, wenn sich durch das Adsorbat oder die neue Oberflächengeometrie auch die Ionenflußdichte und die Reflektivität an der Oberfläche deutlich ändern. Dies ist beispielsweise der Fall für die $\text{Ni}(110)2 \times 1\text{-O}$ -Oberfläche, wo die Analyse der SEE, aus dem Vergleich mit Simulationsrechnungen und übereinstimmend mit früheren Ergebnissen, ein Sägezahn-Rekonstruktionsmodell favorisiert. Änderungen der elektronischen Oberflächenstruktur allein, etwa durch Adsorbatorbitale, ohne zugleich klar veränderte Ionenflußdichte (z.B. bei $\text{Ni}(001)c2 \times 2\text{-O}, [110]$), sind im SEE-Profil nicht feststellbar.

2. Einleitung

Der Beschuß einer Metalloberfläche mit schnellen Ionen führt, neben einer Vielzahl anderer dabei ablaufender Prozesse, auch zur Emission von Sekundärelektronen. Diese Ioneninduzierte Elektronenemission kann durch eine Reihe unterschiedlicher Mechanismen hervorgerufen werden, wie die Anregung von Valenzelektronen durch das Projektil oder die Ionisation in inneren Schalen, eventuell gefolgt von einem Auger-Übergang. Möglich ist auch, daß ein durch das Projektil erzeugtes schnelles Elektron in einer Kaskade weitere Elektronen anregt, oder daß Rückstoßatome, wie sie besonders beim Beschuß mit schweren Ionen auftreten, weitere Sekundärelektronen produzieren.

Trotz dieser weitgehend unspezifischen Erzeugungsprozesse beobachtet man bei Ioneninduzierter Sekundärelektronenemission (SEE) an Einkristallen dennoch Ionengitterführungseffekte. So entstehen Minima der Elektronenausbeute als Funktion des Einschuwinkels Φ zur Kristalloberfläche, wenn der Ionenstrahl parallel zu einer niederindizierten Netzebene einfällt (planare Gitterführung) [01,02]. Hingegen erhält man bei Einschuß unter Bedingungen axialer Oberflächengitterführung (streifend zur Oberfläche und parallel zu einer niederindizierten Gitterrichtung [28]) ein Ausbeutemaximum. Dieser Effekt war aus vorangegangenen Experimenten qualitativ bekannt. Eine genaue und systematische Untersuchung unter Veränderung der Einschuwinkel, der Einschußenergie und der Projektilart (H^+ , He^+) sowie für unterschiedliche Kanalstrukturen (z.B. Semikanal) stand bislang jedoch aus. Insbesondere war ein Zusammenhang zwischen SEE, Ionenfluß und geometrischer Kristall- bzw. Oberflächenstruktur zu erwarten. Ferner fehlte eine zufriedenstellende quantitative Deutung.

Neben Experimenten sollten Computersimulationen zur Klärung der Fragen beitragen. Sie erlauben, durch Erprobung verschiedener Modellansätze für Elektronenproduktion und Oberflächenbeschaffenheit, Aussagen über die Bedeutung der Ionenflußdichte-

verteilung, der freien Weglängen von Elektronen und der Oberflächenrauigkeit. Dabei muß ausdrücklich darauf hingewiesen werden, daß es sich bei der Verwendung einer Computersimulation bei einem elektronentheoretischen Problem nur um einen einfachen klassischen und phänomenologischen Erklärungsversuch der Meßergebnisse handeln kann. Ihm fehlt die eigentlich nötige quantenmechanische Begründung, womit zwangsläufig wesentliche Aspekte der modernen Theorie der Elektronen in Metallen außer Acht gelassen werden. Eine entsprechend umfassende theoretische Behandlung des Problems liegt allerdings noch nicht vor.

In Hinblick auf die Simulationen war es angebracht, neben der SEE auch die Ionenstreuung zu messen, um eine von den Problemen der SEE entkoppelte Referenzgröße zu besitzen.

Ein spezielles Interesse gilt der Untersuchung der SEE bei Fremdatomadsorption oder Rekonstruktion der Oberfläche. Es ist herauszufinden, welchen Einfluß eine dadurch veränderte lokale Ionenflußdichte an der Oberfläche ausübt, ob sich Änderungen der elektronischen Struktur der Oberfläche auswirken und inwieweit die SEE in Verbindung mit Simulationen eine Unterscheidung verschiedener Adsorptions- oder Rekonstruktionsmodelle erlaubt. Dies verdient besonderes Augenmerk, da derzeit keine Methode zur Bestimmung von Oberflächenstrukturen bekannt ist, die hierzu allein definitive Ergebnisse erbringt. Eine Messung der SEE kann nun aber ohne wesentlichen experimentellen Mehraufwand simultan zu jeder Methode durchgeführt werden, die die Oberflächenchengeritterführung zur Oberflächenanalyse nutzt.

In verwandter Weise wurde die SEE bereits von Holmen und Högberg im Kristallvolumen zur Untersuchung von Strahlenschäden und deren Ausheilverhalten eingesetzt [03]. Messungen elektro-neninduzierter SEE während der Adsorption von Fremdatomen liegen für verschiedene Systeme von Argile, Rhead et al. vor [04,05].

Die Wahl des Targetmaterials fiel auf Ni wegen der räumlich stark inhomogenen Valenzelektronendichteverteilung des Übergangsmetalls. Zusammen mit der durch die Gitterführung ebenfalls inhomogenen Ionenflußdichteverteilung sind deshalb interessantere Aufschlüsse über die SEE zu erwarten als etwa bei einem Freien-Elektronen-Metall wie Al.

3. Experimentelle Durchführung

3.1. Beschleuniger, Vakuumsystem und Streukammer

Den für die Experimente verwendeten Strahl leichter Ionen (H^+ , He^+) liefert ein elektrostatischer Linearbeschleuniger (Cockroft-Walton-Generator). In einer 80-MHz-Hochfrequenzionenquelle wird Wasserstoff- bzw. Heliumgas ionisiert und durch eine Extraktionsspannung von 3-4 kV in die Beschleunigungsstrecke befördert. Elektrische Felder und eine Magnetspule am Ausgang der Ionenquelle erlauben die Optimierung dieses Quellenstroms und gleichzeitig eine Fokussierung des Strahls. Alle bisher beschriebenen Vorrichtungen liegen auf zwischen 75 und 300 kV wählbarer Hochspannung, die über die 1 m lange Beschleunigungsstrecke auf Erdpotential abfällt. Die beschleunigten Ionen durchlaufen anschließend einen Analysiermagneten (Fa.Bruker), der für die Massenseparation und die Ablenkung des Strahls in das Strahlrohr sorgt, an dem sich die Streukammer mit dem Versuchsaufbau befindet. Kleinere Hilfsmagnete gestatten Korrekturen an der Strahlführung. Zwei Blenden zu Anfang und Ende des Strahlrohrs ($\varnothing$ 2 mm, Abstand 1,7 m) begrenzen die Strahldivergenz auf $0,13^\circ$. Der schließlich in der Streukammer ankommende Strahlstrom ist typisch 50-150 nA, je nach Projektil, Beschleunigungsspannung und Wahl der Quellenparameter.

Die beiden Strahlrohrblenden ermöglichen zugleich ein differentiell Pumpen von Beschleuniger, Strahlrohr und Streukammer. So sorgen am Beschleunigerteil zwei Turbomolekularpumpen (Fa.Balzers, Saugleistung $S = 200$ l/s) für ein Hochvakuum von $1 \cdot 10^{-4}$ Pa bei Gaseinlaß über ein Feindosiertventil in die Ionenquelle, während das Strahlrohr durch eine Ionengetterpumpe auf $1 \cdot 10^{-6}$ Pa evakuiert ist. In der zylindrischen Streukammer (Abb.3.1) erzeugt eine Turbomolekularpumpe ($S = 200$ l/s) zusammen mit einer Titansublimationspumpe und einem mit flüssigem Stickstoff gefüllten Kühlschild ein Ultrahochvakuum (UHV) von

$1 \cdot 10^{-8}$ Pa, was außerdem ein 12-15stündiges Ausheizen der Kammer bei 200°C erfordert. Ein derartiges Vakuum ist für Experimente an sauberen oder gezielt bedeckten Oberflächen unabdingbar. Denn selbst noch bei einem Druck von $1 \cdot 10^{-8}$ Pa bedeckt sich eine gereinigte Oberfläche innerhalb der durchschnittlichen Versuchsdauer (30 min) mit 0,1-0,2 Monolagen Restgasatomen [06].

Die Totaldruckmessung in der Streukammer geschieht mit einem Bayard-Alpert-Ionisationsvakuummeter (Fa. Varian). Zusätzlich kann das Restgas mit einem Quadrupol-Massenspektrometer [07] (Fa. Balzers) analysiert werden (Partialdrucke). Man findet dabei H , H_2 , C , H_2O und CO , wobei der überwiegend vorhandene Wasserstoff wegen seines niedrigen Haftkoeffizienten unkritisch ist [08].

Weitere Standard-Einbauten im Rezipienten sind ein verfahrbares Auger-Spektrometer, sowie eine Ionenzerstäubungskanone. Die Auger-Einheit (Fa. Varian) besteht aus einem Elektronenenergieanalysator (Zylinderspiegel, CMA) mit integrierter Elektronenkanone. Sie dient zur Kontrolle der Sauberkeit bzw. des Bedeckungszustandes der untersuchten Kristalloberfläche mittels elektroneninduzierter Auger-Elektronenspektroskopie (AES). Die Ionenzerstäubung wird als Methode zur Reinigung der Probenoberfläche eingesetzt. Sputtergas ist Ne (Reinheit 99,999%) bei einem Partialdruck von $1 \cdot 10^{-3}$ Pa. Es kann, ebenso wie der für die Experimente benötigte Sauerstoff (Reinheit 99,999%), über Feindosierventile in die Streukammer eingelassen werden.

Der abnehmbare Deckel der Kammer (Wheeler-Flansch, $\varnothing$ 0,4 m) trägt einen Präzisions-Manipulator (Fa. VG) zur Handhabung des Kristalls im Vakuum, weitere mechanische Durchführungen zur Bedienung und Justierung des übrigen Versuchsaufbaus sowie die nötigen elektrischen Durchführungen.

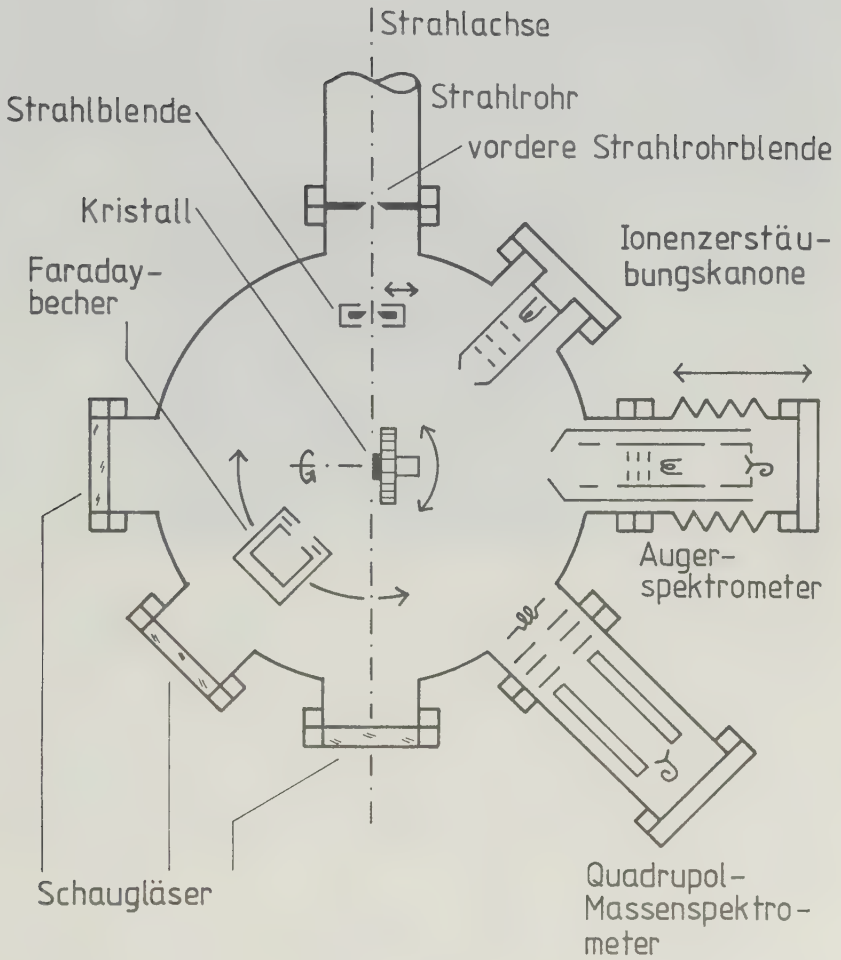


Abb.3.1 : Die Streukammer und ihre Einbauten.

3.2. Kristallpräparation

Zur Herstellung der Ni(110)- und Ni(001)-Oberflächen wird mit einer Wolframdrahtsäge von einer vororientierten Kristallstange 99,999%-iger Reinheit (Fa. Metals Research) eine 2-4 mm starke Scheibe abgeschnitten. Gestörte Oberflächenschichten werden mit Königswasser abgeätzt. Nun wird die Scheibe (Durchmesser 14 mm) zuerst mit Laue-Aufnahmen, dann genauer am Röntgendiffraktometer so auf einer Schleif- und Poliertechnik justiert, daß die anschließende mechanische Bearbeitung eine geometrische Probenoberfläche erzeugt, die bis auf $0,1^\circ$ mit der kristallinen (110)- bzw. (001)-Ebene übereinstimmt.

Diese Bearbeitung besteht aus Naßschleifen mit immer feinkörnigeren Papieren und darauffolgendem Polieren mit 7 μm - und 1 μm -Diamantpaste. Zuletzt elektropoliert man die Kristalloberfläche 5-10 Minuten lang in einem Elektrolyten aus H_3PO_4 und H_2SO_4 [09] bei einer Stromdichte von $0,1 \text{ A/cm}^2$. Dadurch wird eine 4-8 μm dicke Oberflächenschicht abgetragen, wie sich durch Wägung des Kristalls vor und nach dem Elektropolieren feststellen läßt. Dies ist nötig, da die mechanische Politur eine Zerstörung der Einkristallinität der Oberfläche bis etwa in die Tiefe des verwendeten Korndurchmessers zurückläßt [10].

Allerdings entsteht durch das Elektropolieren eine sichtbare Oberflächenwelligkeit, die dann hauptsächlich dafür verantwortlich ist, daß bei der Interpretation der Meßergebnisse (Abschnitt 6) und bei der Computersimulation keine ideal glatte, sondern eine gestufte Oberfläche angenommen werden muß.

Die Oberflächenwelligkeit läßt sich genauer an der Aufstreuung eines an der elektropolierten Oberfläche reflektierten Laserstrahls (Wellenlänge des Laserlichts 633 nm) ablesen. Der halbe Öffnungswinkel dieses Aufstreukegels beträgt bei der Ni(110)-Oberfläche $0,3^\circ$, bei der Ni(001)-Oberfläche $0,2^\circ$. Die Abbildung 3.2 zeigt die elektropolierte Ni(110)-Oberfläche unter dem Phasenkontrastmikroskop :

Man sieht optisch glatte Flächen (Ausdehnung 30-50 μm), innerhalb derer mit dem verwendeten sichtbaren Licht keine Struktur

mehr aufgelöst wird, abgesetzt durch Wälle einiger μm Breite, sowie einzelne tiefe Ätzgrübchen und Kratzer. Da diese Wälle zwischen den einzelnen optisch glatten Bereichen im sichtbaren Licht erkennbar sind, läßt sich auch ihre Höhe in der Größenordnung einiger μm abschätzen.



Abb.3.2 : Phasenkontrastmikroskopaufnahme der Ni(110)-Oberfläche. Größe des Ausschnitts $100\mu\text{m} \times 120\mu\text{m}$.

Zusammenfassend ergibt sich folgendes Bild der in der beschriebenen Weise präparierten Oberfläche :

Man hat optisch glatte Bereiche vorliegen, die gegen die kristallographische (110)- bzw. (001)-Ebene um Winkel geneigt sein können, wie sie sich aus der Laserstrahlaufstreuung ergeben. Diese Bereiche lassen sich mikroskopisch mit dem Modell einer gestuften Oberfläche beschreiben [11]. Es sind die für die Oberflächengitterführung relevanten Flächen. Daneben gibt es Zonen mit steilen Flanken (Wälle, Ätzgrübchen, Kratzer), durch die derjenige Teil des Ionenstrahls, der auf sie trifft, ins Volumen verschwindet und für die Oberflächengitterführung oder die Reflexion verloren ist.

Der letzte Schritt der Oberflächenpräparation findet in der UHV-Kammer statt. Es handelt sich hierbei um die Ionenzerstäu-

bung zur Reinigung der Oberfläche von Adsorbaten (insbesondere O, C und S) und um anschließendes 5-minütiges Tempern des Kristalls bei 1300 K zur Ausheilung der Sputterschäden mittels Elektronenstoßheizung [12]. Diese Prozedur ist vor jedem Experiment zu wiederholen. Zu Anfang, also nach der mechanischen und elektrochemischen Präparation, ist sie sogar mindestens 50 Mal zyklisch hintereinander durchzuführen, da beim Glühen S an der Oberfläche segregiert und durch neuerliches Zerstäuben entfernt werden muß, bis die Oberflächenzone an S verarmt ist.

Die Abbildung 3.3 zeigt Auger-Elektronenspektren der gereinigten Oberflächen, wie sie vor der Durchführung eines Experiments vorgelegen haben. Die Einkristallinität der Oberfläche wurde in getrennten Voruntersuchungen mit LEED kontrolliert. Außerdem ist sie in situ durch Blocking-Muster überprüfbar, die die gestreuten Ionen am fluoreszierenden rückwärtigen Schauglas der Streukammer hervorrufen.

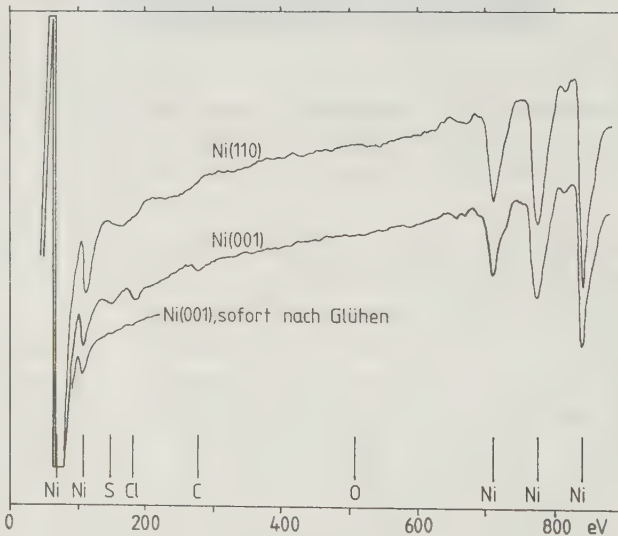


Abb.3.3 : Auger-Elektronenspektren der gereinigten Oberflächen. Die 180eV-Linie im Ni(001)-Spektrum fehlt unmittelbar nach dem Glühen und wird als temperaturabhängige Struktur (TDS [13,14]) aufgefaßt.

3.3. Meßanordnung und Meßgenauigkeiten

Die Meßanordnung ist in Abbildung 3.4 wiedergegeben. Der Ionenstrahl gelangt durch die Strahlrohrblende und eine weitere Strahlblende, die neben der Begrenzung des Strahlprofils auch die Überwachung des ankommenden Strahlstroms gestattet, streifend auf die Kristalloberfläche. Die hier emittierten Sekundärelektronen fließen über die Wände und andere geerdete Einbauten des Rezipienten nach Masse ab. Sie lassen sich zusammen mit den auftreffenden, nicht reflektierten Ionen als positiver Targetstrom I_t am Kristall messen. Wie weiter unten gezeigt wird, ist der Anteil des Ionenstroms an I_t unter den vorliegenden Einschußbedingungen vernachlässigbar. Die SEE-Ausbeute wird so über I_t bestimmt [15,16,17]. Gestreute Ionen oder der direkte Strahl können mit dem Faraday-Becher, der um die Kristalloberfläche schwenkbar ist (Winkel Φ_c , vgl. auch Abb.3.1), aufgefangen werden. Die aufgesammelten Ladungen fließen als Becherstrom I_c ab.

Die Messung von I_t , I_c und dem Strahlblendenstrom I_{bl} geschieht über Stromintegratoren (Fa.ORTEC; Mod.439), die pro 10^{-10} C aufgesammlter Ladung einen Puls abgeben, der jeweils gezählt wird. Ein Kleinrechner steuert den gesamten Ablauf und liest die Zähler (Fa.ORTEC; Mod.715) aus. Eine Messung wird beendet, d.h. alle Zähler werden gestoppt, wenn der Zähler des Strahlblendenstroms einen voreingestellten Wert erreicht hat.

Diese Strahlblende besteht aus einem 0,2 mm breiten, zur Kristalloberfläche parallel ausgerichteten Schlitz und bewirkt, daß der Strahl für Einschußwinkel $\Phi \geq 1^\circ$ nur die Kristalloberfläche, nicht auch die Stirnfläche oder einen Teil der Halterung trifft. Bei Verwendung der Strahlblende beträgt der am Kristall ankommende Strahlstrom I_o noch 5-20 nA. Der auf der Blende auftreffende, nicht durchgelassene Ionenstrom, sowie die von ihm an der Blende ausgelösten Sekundärelektronen fließen als Strahlblendenstrom I_{bl} ab und liefern ein dem Strahlstrom proportionales Signal. Damit ist die Möglichkeit gegeben, kleine zeitliche Schwankungen und Driften, wie sie die Strahlintensität gewöhnlich aufweist, automatisch zu korrigieren :

Für jeden Meßpunkt soll eine gleiche Anzahl einfallender Ionen

beitragen, was einer festen Ladungsmenge des aufintegrierten Strahlblendenstroms und so einem voreinstellbaren Zählerergebnis entspricht. Die Strahlblende ist abgeschirmt, um zu verhindern, daß einerseits an der Blende entstandene Sekundärelektronen auf den Kristall gelangen und I_t verfälschen und andererseits am Kristall ausgelöste Elektronen den Strahlblendenstrom beeinflussen. Der Abstand Strahlblende-Kristall beträgt 120 mm.

Der Kristall selbst ist elektrisch isoliert auf einem Polyspionspiegel, dieser wiederum am Manipulator montiert. Ein Laserstrahl fällt durch das hintere Schauglas der Streukammer auf einen der Spiegel, sein Reflex kann auf einer Winkelskala 2,5 m hinter dem Rezipienten abgelesen werden und erlaubt so eine Kontrolle der eingestellten Winkel ϕ und θ mit einer Genauigkeit von besser als $0,1^\circ$. Die Brechung des Laserstrahls beim Durchgang durch das Schauglas ist vernachlässigbar [18]. Der Manipulator ermöglicht die Veränderung der Winkel ϕ (zur Oberfläche) und θ (zur gewählten niederindizierten Richtung in der Oberfläche), sowie die Translation des Kristalls in allen drei Raumrichtungen.

Damit läßt sich die präzise Justierung der Kristalloberfläche relativ zum einfallenden Strahl bewerkstelligen. Damit die Kristalloberfläche in der Strahlmitte und parallel zur Strahlrichtung liegt ($\phi = 0^\circ$), muß beispielsweise der direkte Strahlstrom, gemessen mit dem Faraday-Becher bei $\phi_c = 0^\circ$, genau um die Hälfte reduziert sein und bei jeder Variation von ϕ weiter absinken, da der Kristall dann noch mehr vom direkten Strahl abfängt. Alternativ kann der Targetstrom I_t zur Ermittlung der $\phi = 0^\circ$ -Position benutzt werden [19,20,21]. Diese Position ist so mit einem Fehler von $0,1^\circ$ festzulegen. Das Targetstrommaximum bei Einschub parallel zu einer niederindizierten Oberflächenrichtung wird, etwa bei $\phi = 1^\circ$, zunächst grob mit einem Analog-Amperemeter gesucht. Erst dann erfolgt die genaue Vermessung mit den Zählern und in definierten Winkelschritten.

Der Targetstrom I_t setzt sich aus mehreren Anteilen zusammen. Normiert man auf den einfallenden Ionenstrom I_0 hat man :

$$(3.1) \quad I_t/I_0 = \gamma + I_{ion}/I_0 - I_r/I_0 \quad .$$

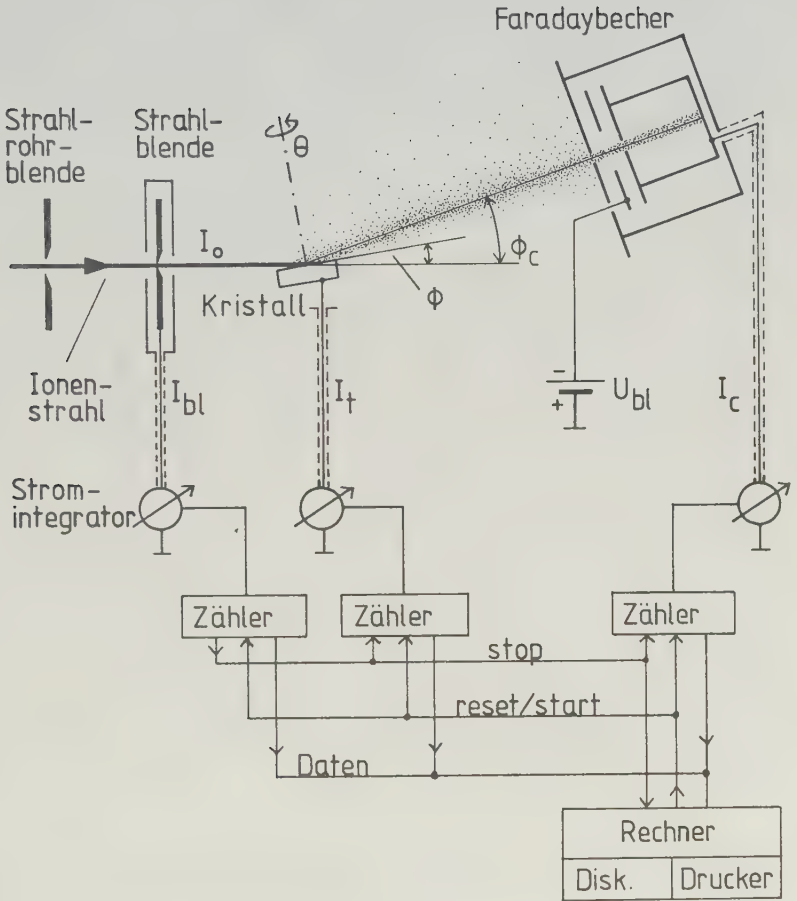


Abb.3.4 : Schematische Darstellung der Meßanordnung.

Dabei ist γ die mittlere Zahl emittierter Sekundärelektronen pro einfallendem Ion (absolute SEE-Ausbeute oder SEE-Koeffizient), die eigentlich zu untersuchende Größe. I_{ion} ist die Summe der Ionenströme zum bzw. vom Kristall, wobei neben I_0 auch der Strom gestreuter Ionen (die bei He^+ -Einschuß auch doppelt positiv geladen sein können) zu berücksichtigen ist. Ströme abgesputterter Ni-Ionen sind aufgrund der leichten Primär-Projektile allerdings vernachlässigbar [22,23]. I_{ion} hängt von den Einschußwinkeln ϕ , θ und von der Einschußenergie E ab, jedoch ist jedenfalls $|I_{\text{ion}}/I_0| < 1$. In den untersuchten Fällen betragen die Meßwerte für I_t/I_0 (Abschnitt 6) bei Randomeinschuß ($\theta = 5^\circ$) für H^+ (He^+) jedoch $I_t/I_0 \geq 20$ ($I_t/I_0 \geq 40$), im interessanten Bereich um $\phi = 1^\circ$ sogar $I_t/I_0 \geq 30$ ($I_t/I_0 \geq 60$). Bei Einschuß parallel zu einer niederindizierten Richtung ($\theta = 0^\circ$) liegen die Werte jeweils noch um einen Faktor 1,5-2,5 höher. Infolgedessen muß I_{ion}/I_0 in (3.1) nicht gesondert bestimmt werden. Es läßt sich auch bei den Fehlergrenzen für γ mitberücksichtigen (Abbn.6.29a und 6.30).

I_r schließlich ist der Strom rückläufiger Elektronen. Das sind Elektronen, die durch gestreute Ionen oder Neutralteilchen an den Wänden und Einbauten des Rezipienten ausgelöst werden (< 3 Elektronen/Teilchen [24,25]), über den Kristall abfließen und so I_t verringern. Ihr Beitrag ist aber gleichfalls zu vernachlässigen, da die Wahrscheinlichkeit p , daß ein an der Wand ausgelöstes Elektron den geerdeten Kristall trifft, gering ist : $p \leq r^2\pi/2\pi R^2 = 2,5 \cdot 10^{-3}$

(r : Kristallradius, = 7 mm;

R : durchschnittlicher Abstand Wand-Kristall, ≈ 100 mm).

Zudem wird bei der Messung ein großer Teil der gestreuten Primärteilchen im Faraday-Becher aufgefangen und verursacht so keine störende Elektronenemission. Die Frage nach der Bedeutung von I_r kann auch experimentell geprüft werden. Da die meisten der an den Wänden entstandenen Elektronen nur Energien von wenigen eV besitzen [26], wird I_r durch eine negative Kristallvorspannung unterdrückt. Abbildung 3.5 zeigt ein relatives SEE-Ausbeuteprofil (wie es in Abschnitt 6 diskutiert wird), aufgenommen ohne Vorspannung und mit einer Vorspannung

von -20 V. Dabei ist bezüglich der Höhe, der Halbwertsbreite und der Struktur der Kurve kein Einfluß von I_T zu bemerken. Mit steigender Vorspannung machen sich Leckströme nach Masse hin bemerkbar, die ebenfalls I_T verfälschen. Deshalb, und weil zur Unterdrückung von I_T offenbar unnötig, wurden die Experimente ohne Kristallvorspannung durchgeführt.

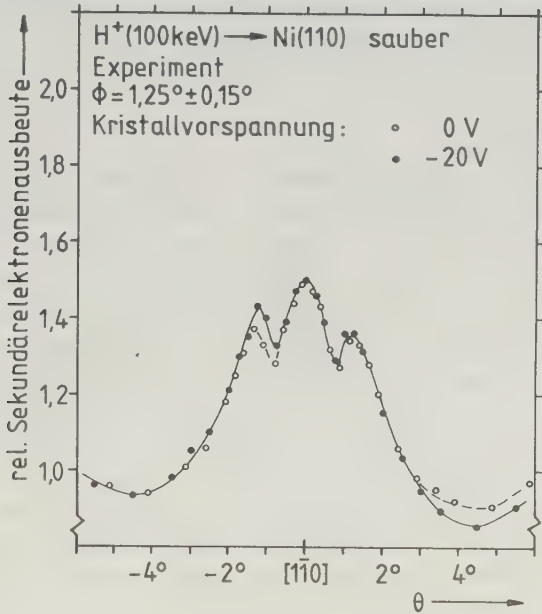


Abb.3.5 : SEE-Ausbeuteprofil mit und ohne negative Vorspannung am Kristall.

Der Faraday-Becher besteht aus dem eigentlichen Ionenauffänger, umgeben von einer Abschirmung (Abb.3.4), die verhindert, daß andere Ladungen als die der aufgesammelten Ionen auf ihn gelangen können und so I_C gegenüber dem interessierenden Ionenstrom verfälschen. Dem gleichen Zweck dient eine Blende zwischen der Eintrittsöffnung im Becher und der in der Abschirmung.

Sie liegt auf einer negativen Spannung von $U_{b1} = -150$ V. Für die durchtretenden schnellen Ionen ist dies ohne Bedeutung. Doch verhindert die durch die Spannung aufgebaute Potentialbarriere, daß Sekundärelektronen vom Kristall in den Becher und Sekundärelektronen, die durch die aufgefangenen Ionen im Becher entstehen, aus diesem heraus gelangen. Der angegebene Wert von U_{b1} wurde aus einer Messung von I_C als Funktion von U_{b1} bei verschiedenen Geometrien (bzgl. θ , ϕ und ϕ_C) ermittelt. I_C nimmt ab $U_{b1} \approx -80$ V einen konstanten Wert an, so daß für das gewählte $U_{b1} = -150$ V die Unterdrückung unerwünschter Sekundärelektronen sicher wirksam ist.

Der Abstand vom Kristallmittelpunkt zur Eintrittsöffnung in der Abschirmung beträgt 75 mm. Die Eintrittsöffnungen selbst sind Rechtecke mit der Längsseite parallel zur Kristalloberfläche. Die Breite der Rechtecke ist so gewählt (2 mm), daß in der Stellung $\phi_C = 2 \cdot \phi$ (für $0,5^\circ \leq \phi \leq 1,5^\circ$) alle diejenigen gestreuten Ionen aufgefangen werden, die die Kristalloberfläche unter einem Winkel ϕ_{aus} (zur Oberfläche) mit $\phi - 0,5^\circ \leq \phi_{aus} \leq \phi + 0,5^\circ$ verlassen. Sie sind im folgenden als reflektierte Ionen bezeichnet, um sie von den Ionen zu unterscheiden, die mit beliebigem ϕ_{aus} gestreut werden. Die Länge der Rechtecke (parallel zur Kristalloberfläche) ist so groß, daß sich für die Streuwinkel θ_{aus} der Teilchen (Winkel zur niederindizierten Richtung in der Oberfläche) keine wirksamen Einschränkungen ergeben ($-10^\circ \leq \theta_{aus} \leq 10^\circ$ bei $\theta = 0^\circ$).

Die Beschränkung der Ionenstreumessungen auf die reflektierten Ionen erfolgt mit Hinblick auf die Computersimulation. Abbildung 3.6 zeigt gerechnete Streuerverteilungen [27,28] für $H^+(150\text{keV})$ -Streuung an einer idealen $Ni(110)$ -Oberfläche, sowohl für Einschub parallel zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung ($\theta = 0^\circ$), als auch für Randeneinschub ($\theta = 7^\circ$). Dazwischen ($\theta = 3^\circ$) findet ein allmählicher Übergang mit stärkerer Aufstreuung auch nach außerhalb der Becheröffnung statt. Man sieht daraus, daß die Mehrzahl gestreuter Teilchen tatsächlich im für die Experimente gewählten Reflexionsintervall $\phi - 0,5^\circ \leq \phi_{aus} \leq \phi + 0,5^\circ$ ankommt.

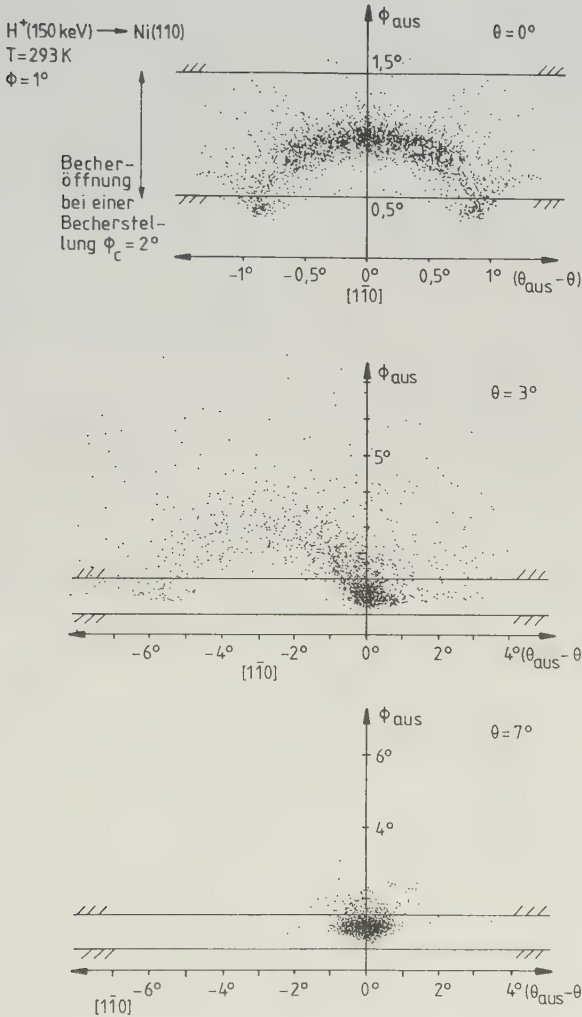


Abb.3.6 : Simulierte Winkelverteilungen gestreuter Teilchen (aus [28]). Bezeichnungen :

Reflektierte Ionen : Ionen, die vom Faraday-Becher in der Stellung $\phi_c = 2 \cdot \phi$ aufgefangen werden.

Gestreute Ionen : Alle Ionen, die den Kristall wieder verlassen (ϕ_{aus} beliebig).

Wichtiger ist aber die Tatsache, daß die reflektierten Ionen längs ihrer ganzen Trajektorie gittergeführt sind, also Bahnen beschreiben, die in der Computersimulation genauer wiedergegeben werden als solche, die Großwinkelstöße enthalten (wie es bei den nach außerhalb des Reflexionswinkelintervalls gestreuten Teilchen normalerweise der Fall ist). Deshalb bieten die reflektierten Ionen für den Vergleich von Simulation und Experiment die günstigeren Voraussetzungen, insbesondere bei rauen Oberflächen.

Die Abbildung 3.7 schließlich zeigt I_C in Abhängigkeit von Φ_C unter Einschußbedingungen wie in den Rechnungen aus Abbildung 3.6. Dabei werden diese Rechnungen bestätigt : Der maximale Becherstrom tritt wie erwartet für $\Phi_C = 2 \cdot \Phi = 2^\circ$ auf, da hier die meisten gestreuten Ionen aufgefangen werden.

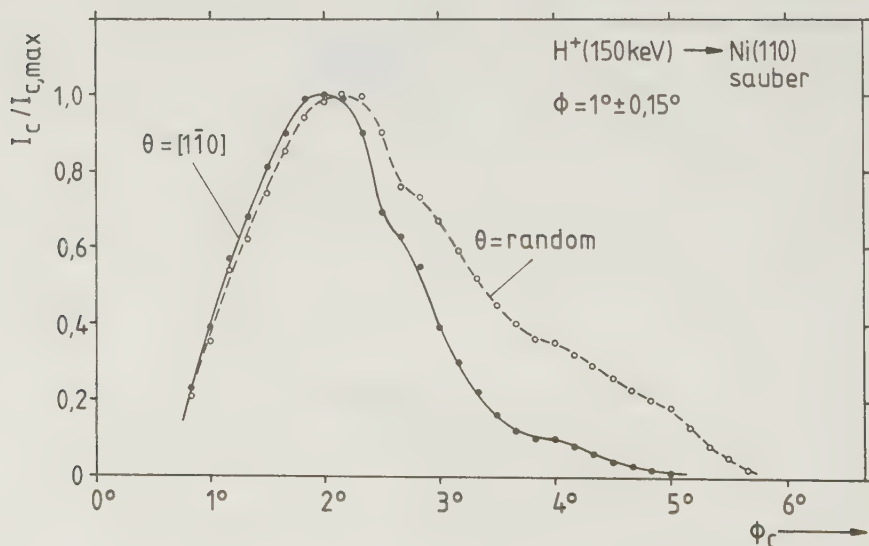


Abb.3.7 : $I_C(\Phi_C)$ ist der Strom der gestreuten Ionen, die vom Faraday-Becher in der Stellung bei Φ_C (Abb.3.4) aufgefangen werden. Das sind jeweils alle Ionen mit Austrittswinkeln $\Phi_C - \Phi - 0,5^\circ \lesssim \Phi_{aus} \lesssim \Phi_C - \Phi + 0,5^\circ$.

4. Ionengitterführung

4.1. Analytische Beschreibung

4.1.1. Grundlagen

Treffen schnelle Ionen unter einem kleinen Winkel ψ zu einer niederindizierten Gitterrichtung $[hkl]$ auf einen Kristall, verläuft ihre weitere Trajektorie als eine Abfolge korrelierter Kleinwinkelstöße, wobei eine klassische Betrachtung zulässig ist [29]. Die Wechselwirkung des Projektils mit einem einzelnen Targetatom wird nämlich bestimmt durch die Coulombabstoßung der Kernladungen Z_1 (Projektil) und Z_2 (Targetatom), die durch die umgebenden Elektronen abgeschirmt ist. Zur Beschreibung dieser Wechselwirkung eignet sich, in den hier zu diskutierenden Fällen, vorzüglich ein Thomas-Fermi-Molière-Potential [30] :

$$(4.1) \quad U_{\text{tfm}}(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Sigma \alpha_i \exp(-\beta_i r / a_{\text{tf}}) \quad ,$$

$\alpha_i = (0,1; 0,55; 0,35) \quad , \quad \beta_i = (6,0; 1,2; 0,3) \quad ,$
 r : Abstand Projektil-Targetatom ,
 e : Elementarladung ,

Thomas-Fermi-Radien a_{tf} (a_0 :Bohrscher Radius) [31] :

$$\begin{aligned} a_{\text{tf,He}} &= 0,8853 \cdot a_0 \cdot (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2} \\ &= 0,0142 \text{ nm für He} \rightarrow \text{Ni} \\ &= 0,0198 \text{ nm für He} \rightarrow \text{O} \quad , \\ a_{\text{tf,H}} &= 0,8853 \cdot a_0 \cdot Z_2^{1/3} \\ &= 0,0154 \text{ nm für H} \rightarrow \text{Ni} \\ &= 0,0234 \text{ nm für H} \rightarrow \text{O} \quad . \end{aligned}$$

Die Wechselwirkung des Projektils mit einer ganzen Atomkette $[hkl]$ im Kristall ist nun gegeben durch die Überlagerung aller einzelnen Atompotentiale zu einem Kettenpotential $U_{\text{ch}}(r,x)$, wobei dieses Kettenpotential zweckmäßigerweise in Zylinderkoordinaten mit der betrachteten Kette als Zylinderachse angeschrie-

ben wird (Abb.4.1). Die Winkelkoordinate entfällt wegen der Rotationssymmetrie um die Zylinderachse. Für $r > r_C$, einem kritischen Abstand, wird auch die x-Abhängigkeit von U_{Ch} bedeutungslos, d.h. sie mittelt sich über eine Ionenbahn entlang der Kette heraus [29,32,33]. Wirksam ist dann nur mehr ein Kontinuumskettenpotential $U_{Ch}(r)$. Reicht die Querenergie $E_{\perp}$ eines Projektils senkrecht zu einer Kette nicht aus, um sich dieser um mehr als r_C zu nähern, $E_{\perp} < U_{Ch}(r_C)$, wird es folglich einfach an einem glatten Zylinderpotential, unter Erhaltung des Impulses parallel zur Kette, reflektiert. Dasselbe wiederholt sich an benachbarten Ketten (axiale Ionengitterführung, Channeling). Großwinkelstöße kommen nicht vor, da sie bei Potentialen wie (4.1) Stoßparameter $q < r_C$ erfordern. Für Potentiale vom Thomas-Fermi-Typ gilt nach Varelas und Sizmann [33,34] :

$$(4.2) \quad r_C = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2 d_{[hkl]}}{E} \right)^{1/2} \cdot f(Z_1, Z_2, E, d_{[hkl]})$$

$$\text{mit } f = 1 + 0,2 \cdot \ln \left(\frac{0,2 \cdot E a_{tf}^2}{Z_1 Z_2 e^2 d_{[hkl]}} \right) ,$$

$d_{[hkl]}$: Atomabstand in der [hkl]-Kette ,
 E : Projektilenergie .

Dem r_C entspricht ein kritischer Winkel ψ_C , bis zu dem das Kontinuumsmodell, gemäß $E_{\perp} = E \cdot \sin^2 \psi_C \approx E \cdot \psi_C^2 = U_{Ch}(r_C)$, anwendbar bleibt. In erster Näherung findet man [32] :

$$(4.3) \quad \psi_C = \left(\frac{2 Z_1 Z_2 e^2}{E d_{[hkl]}} \right)^{1/2} .$$

r_C ist vergleichbar mit a_{tf} (also $r_C \ll$ Gitterkonstanten), ψ_C beträgt wenige Grad (z.B. für $H^+(150\text{keV}) \rightarrow Ni[1\bar{1}0]$: $r_C = 0,008 \text{ nm}$; $\psi_C = 2,7^\circ$).

Analog zur axialen Gitterführung an Atomketten können einfallende Ionen auch durch ebene Kontinuumpotentiale niederindizierter Netzebenen (uvw) geführt werden (planare Ionengitterführung) [32]. Der diesbezügliche kritische Winkel ϕ_{crit} zur betrachteten Netzebene lautet [33] :

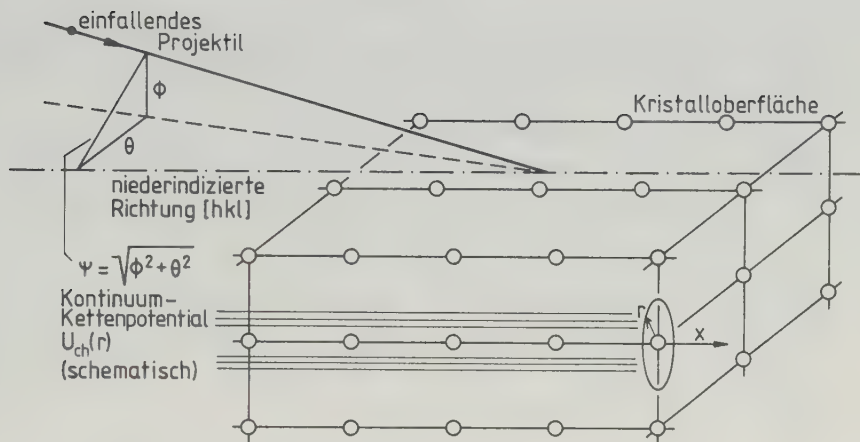


Abb.4.1 : Definition der Winkel Φ , Θ und Ψ .

$$(4.4) \quad \Phi_{\text{crit}} = \left(\frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2 a_{\text{tf}} A(uvw)}{E} \right)^{1/2},$$

$A(uvw)$: mittlere Anzahl von Atomen pro Flächeneinheit in der Netzebene (uvw) .

$\Psi > \Psi_c$ bezeichnet man als "Random"-Einschuß.

4.1.2. Axiale und planare Oberflächengitterführung

Für Einschußwinkel $\Psi = (\Phi^2 + \Theta^2)^{1/2} < \Psi_c$ (Abb.4.1) wird axiale Gitterführung entlang der obersten Atomketten $[hkl]$ einer Kristalloberfläche möglich. Trotz der kleinen Winkel Φ und Θ kann auch planare Gitterführung auftreten:

Denn der Winkel χ zwischen der Impulskomponente $p_{\perp, [hkl]}$ des Projektils senkrecht zu $[hkl]$ und der Oberfläche (mit $\tan \chi = \Phi/\Theta$) kann dem Winkel $\phi(uvw)$ zwischen der (mno) -Oberfläche und einer (uvw) -Ebene entsprechen. Bei gegebenem Φ ist dies der Fall für :

$$(4.5) \quad \Theta(uvw) = \Phi \cdot \cot(\phi(uvw)) \quad \text{mit} \quad \cos(\phi(uvw)) = \frac{(u, v, w)(m, n, o)}{\sqrt{(u^2 + v^2 + w^2)(m^2 + n^2 + o^2)}}.$$

Allerdings hat dann noch Ψ größer als ein Ψ_{min} zu sein, damit

eine ausreichende Impulskomponente parallel zu (uvw) existiert. Für ein Thomas-Fermi-Molière-Potential (4.1) ist [35] :

$$(4.6) \quad \psi_{\min} = \left(- \frac{\pi d_{ap}}{4 a_{tf}} \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{E d[hkl]} \sum \alpha_i \beta_i \exp(-\beta_i d_p / (2a_{tf})) \right)^{1/2}$$

d_{ap} : Abstand der [hkl]-Ketten in der (uvw)-Ebene ,

d_p : Abstand der (uvw)-Ebenen .

Eine spezielle Form planarer Gitterführung ist die planare Oberflächengitterführung. Man findet sie für ein $\Phi < \Phi_{sp}$ und $\Theta = \text{random}$ (d.h. bei großem Winkel zu einer niederindizierten Oberflächenrichtung). Hier wirkt die gesamte Kristalloberfläche (uvw) als ein ebenes Potential [28] :

$$(4.7) \quad U_p(z) = 2\pi Z_1 Z_2 e^2 a_{tf} \cdot A(uvw) \cdot \sum (\alpha_i / \beta_i) \exp(-\beta_i z / a_{tf}) .$$

Das bedeutet, daß der Parallelimpuls $p_{\parallel}$ des Projektils zur Oberfläche bei der Streuung erhalten bleibt und der senkrechte Impuls $p_{\perp}$ sich umkehrt $p_{\perp} \rightarrow -p_{\perp}$. Derart gestreute Ionen werden als spiegelreflektierte Ionen bezeichnet. Φ_{sp} ergibt sich aus (4.4) anstelle von Φ_{crit} .

Kommt man für $\Phi < \Phi_{sp}$ mit Θ nahe an eine niederindizierte Richtung [hkl] in der Oberfläche ($\Theta = 0^\circ$), spürt das Projektil kein planares Potential mehr, sondern [hkl]-Zylinderpotentiale. Dann gilt $p_{\parallel, [hkl]} = \text{const.}$, aber nur mehr $|p_{\perp, [hkl]}| = \text{const.}$, was zu einer halbkreisförmigen Aufstreuung bei den reflektierten Teilchen führt (Abb.3.6a). Dieser Übergang von der planaren zur axialen Oberflächengitterführung tritt auf bei [28] :

$$(4.8) \quad \Theta_{ap} = \left(- \frac{\pi d_{ap}}{4 a_{tf}} \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{E d[hkl]} \sum \alpha_i \beta_i \exp(-\beta_i z_{\min} / a_{tf}) \right)^{1/2}$$

$z_{\min}$: Minimalabstand Bahn-Oberfläche bei $\Theta = \text{random}$.

Eine weitere Besonderheit der Oberflächengitterführung ist die Fokussierung des einfallenden Strahls. Benachbarte Atomketten der Oberfläche wirken auf die parallel ankommenden Ionen wie eine elektrostatische Sammellinse [36,37]. Liegt der Brennpunkt dieser Linse gerade über einer Atomkette in der zweiten Atomlage, resultiert für die Teilchen eine erhöhte Reflektivität [38].

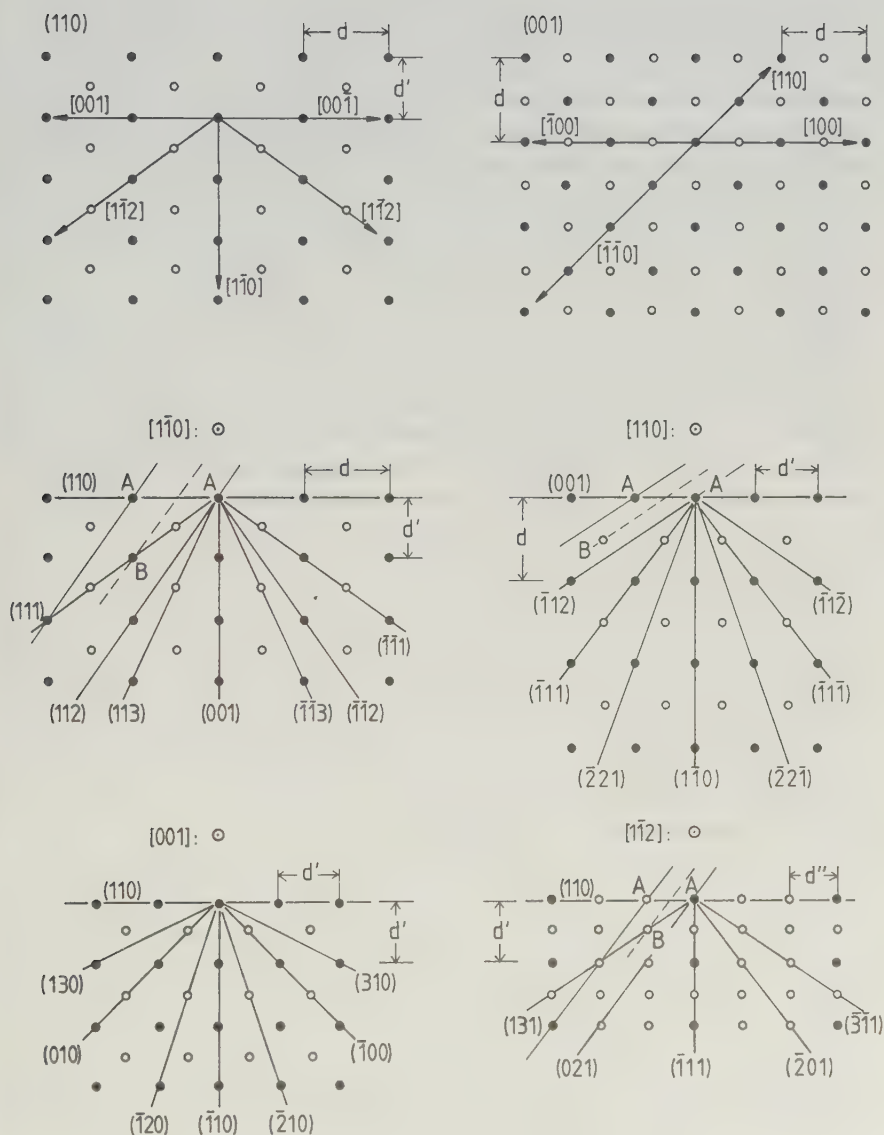


Abb.4.2 : Die Abbildung zeigt die Gittergeometrie der untersuchten Ni-Oberflächen und Richtungen (unrekonstruiert) .
 $d = 0,352 \text{ nm}$, $d' = d/\sqrt{2} = 0,249 \text{ nm}$, $d'' = d/\sqrt{3} = 0,204 \text{ nm}$

4.1.3. Reaktionsausbeuten bei Gitterführung

Durch die Ionenbestrahlung eines Kristalls können verschiedene Reaktionen ausgelöst werden: Auger-Elektronenemission, Röntgenemission, Kernreaktionen oder SEE. Die Ausbeute solcher Reaktionen ist unterschiedlich für Randeneinschuß und für Gitterführung. Der Grund hierfür liegt zunächst in der Stoßparameterabhängigkeit des Wirkungsquerschnitts der Reaktion, sowie in der durch die Gitterführung hervorgerufenen inhomogenen Ionenflußdichteverteilung im Kristall [39,40]. Diese Flußdichte ist bei Gitterführung in der Mitte eines axialen oder planaren Kanals gegenüber einer Randomverteilung überhöht, am Kanalrand, also am Ort der Targetatome, entsprechend reduziert. Erfordert eine Reaktion kleine Stoßparameter, ist ihre Ausbeute folglich dadurch verringert. Hier wie im folgenden ist stets von Reaktionen der Ionen mit den Targetatomen die Rede, die auch für die Gitterführung verantwortlich sind (z.B. nicht von Fremdatomen auf Zwischengitterplätzen).

Wie gezeigt wird, erhält man bei der Gitterführung im Volumen (Ioneneinschuß steil zur Oberfläche) stets ein Minimum der Reaktionsausbeute, wenn der Wirkungsquerschnitt der Reaktion mit zunehmendem Stoßparameter monoton abnimmt. Das Auftreten eines Ausbeutemaximums, wie im Fall der SEE (Abschnitt 6), ist nur bei Oberflächengitterführung möglich und stellt einen charakteristischen Unterschied zur Gitterführung im Volumen dar.

Man betrachte dazu zuerst einen steil zur Oberfläche einfallenden homogenen Strahl (Abb.4.3) mit Winkel $\psi = 0^\circ$ bzw. $\psi = \psi_c$ zu einer niederindizierten Richtung (im gezeichneten Beispiel die z-Achse) und einer Flußdichte $\langle j \rangle = j_0 e_z^0$ (e_z^0 : z-Einheitsvektor). In der i-ten Atomlage im Kristallinnern bildet sich dann die Flußdichteverteilung $\langle j \rangle_i = j_i(\psi; x, y) e_z^0$ aus, bei $\psi = 0^\circ$ mit deutlicher Überhöhung in der Kanalmitte, bei $\psi = \psi_c$ mit einer breiten Verteilung und schwacher Überhöhung. Dabei gilt stets

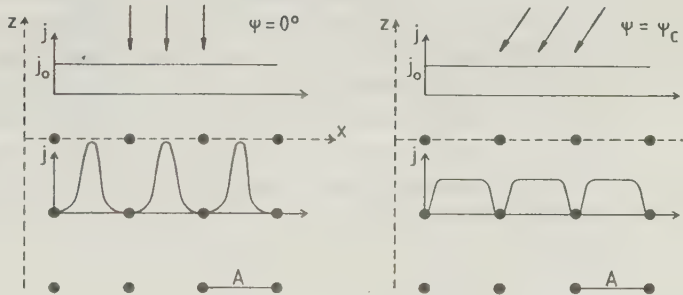
$$(4.9) \quad A^{-1} \cdot \int_A j_i(\psi; x, y) dx dy = j_0 \quad ,$$

vorausgesetzt, man kann Teilchenverluste durch Rückstreuung, Dechanneling und Abbremsung vernachlässigen. Dies folgt aus der Translationssymmetrie senkrecht zu e_z^0 und aus der Teilchenzahl-erhaltung. Betrachtet man nun weiter den Extremfall einer stoßparameterunabhängigen Reaktion (Wirkungsquerschnitt σ_0), ergibt sich für deren Ausbeute Y pro Zelle A :

$$(4.10) \quad Y = \int_A \sigma_0 \cdot j_i(\psi; x, y) dx dy = A \cdot j_0 \cdot \sigma_0 \quad ,$$

unabhängig vom Einschußwinkel ψ . Im Fall einer Reaktion, deren Wirkungsquerschnitt mit dem Stoßparameter q abnimmt, verlagert man schließlich beim Übergang von $j_i(\psi_C; x, y)$ zu $j_i(\psi=0^0; x, y)$ Teilchen aus Orten hoher Reaktionswahrscheinlichkeit in solche mit niedriger Reaktionswahrscheinlichkeit und erhält so bei $\psi = 0^0$ stets ein Minimum.

Abb.4.3 : Ionen-
flußdichten bei
Gitterführung im
Volumen.



Bei streifendem Einschuß und Oberflächengitterführung interessiert nun analog die Flußdichteverteilung $\langle j \rangle = j(y, z) e_x^0$ (e_x^0 : x-Einheitsvektor) in einer Zelle A in einer Ebene $x \equiv \text{const.}$, senkrecht zum einfallenden Strahl (Abbn.4.4 und 4.5). In dieser Ebene hat man wegen der Oberfläche keine Translationssymmetrie in z -Richtung. Infolgedessen ist (4.9) nicht übertragbar. Die Teilchenzahlerhaltung verlangt nur noch, daß

$$(4.11) \quad \lim_{\bar{y}, \bar{z} \rightarrow \infty} (4\bar{y}\bar{z})^{-1} \cdot \int_{-\bar{y}-\bar{z}}^{\bar{y}} \int_{-\bar{z}}^{\bar{z}} j(y, z) dy dz = \text{const.}, \quad \text{für alle } x \equiv \text{const.}$$

Bei perfekter planarer Oberflächengitterführung verläuft eine Bahntrajektorie schematisch so, wie in Abbildung 4.4 gestrichelt dargestellt. Das Projektil kommt an die Oberfläche, wird über m_1 Gitterkonstanten nahe der Oberfläche geführt und verläßt sie dann wieder. Der Betrag der einfallenden Flußdichte ist $j_0 = N/A$ (die N einfallenden Teilchen sind durch starke Pfeile gekennzeichnet). Die mittlere Flußdichte in der Zelle A_0 (mit Fläche A) ist jedoch :

$$(4.12) \quad j(A_0) = A^{-1} \cdot (N + N + m_1 \cdot N \cdot \tan\Phi) = j_0(2 + m_1 \cdot \tan\Phi) > j_0.$$

Beitrag der nahe der Oberfläche
über m_1 Gitterkonstanten ge-
führten Teilchen ;

Beitrag der reflektierten Teilchen ;

Beitrag der einfallenden Teilchen ;

Die über eine Zelle gemittelte Flußdichte kann also bei Oberflächengitterführung höher sein, als die Flußdichte der einfallenden Ionen, da die über viele Zellen hinweg eingeschossenen Ionen alle an der Oberfläche konzentriert werden. In der Zelle A_1 unter der Oberfläche tritt dagegen kein Fluß auf : $j(A_1) = 0$.

Bei Einschub parallel zu einer niederindizierten Richtung ($\theta = 0^\circ$), idealer Oberflächengitterführung und Fokussierung im obersten Kanal ergibt sich ein Bild wie in Abbildung 4.5. Die mittlere Flußdichte in A_1 beträgt ähnlich zu (4.12) :

$$(4.13) \quad j(A_1) = j_0 \cdot (\kappa + m_2 \cdot \tan\Phi) ,$$

mit $\kappa \leq 2$, da jetzt die Beiträge einfallender und reflektierter Teilchen jeweils kleiner N sind. Nimmt man als Spezialfall eine unter der Oberfläche stoßparameterunabhängige Reaktion :

$$(4.14) \quad \sigma = \begin{cases} \sigma_0 & z \leq 0 \\ 0 & z > 0 \end{cases} ,$$

erkennt man, daß sich bei $\Phi < \Phi_{sp}$ und $\theta = \text{random}$ (Spiegelreflexion) die Ausbeute Null ergibt. Bei Einschub parallel zur niederindizierten Richtung ($\theta = 0^\circ$) hat man aber einen ausgeprägten Ionenfluß unter der Oberfläche und folglich eine endliche Ausbeute. Daraus ist ersichtlich, daß bei der Oberflächen-

gitterführung, bei entsprechendem Wirkungsquerschnitt σ , für $\Theta = 0^\circ$ ein Ausbeutemaximum entstehen kann.

Realistische Wirkungsquerschnitte σ sind stoßparameterabhängig und reichen über $z = 0$ hinaus. Der Verlauf eines Ausbeuteprofiles folgt dann aus dem Zusammenwirken von Stoßparameterabhängigkeit, inhomogener Ionenflußdichteverteilung und Reflexion. Dabei sind zusätzlich noch die unterschiedlichen Verweilzeiten bis zum Wiederverlassen der Oberfläche zu berücksichtigen (m_1, m_2 in Abbn.4.4 und 4.5). Es kommt darauf an, welcher Einfluß überwiegt. Je nach betrachteter Reaktion sind auch hier Ausbeuteminima möglich [39]. Wichtig ist aber, daß für die Erklärung von Reaktionsausbeuten bei Oberflächengitterführung die Teilchenreflexion neben der Stoßparameterabhängigkeit und der inhomogenen Ionenflußdichteverteilung bedeutsam werden kann.

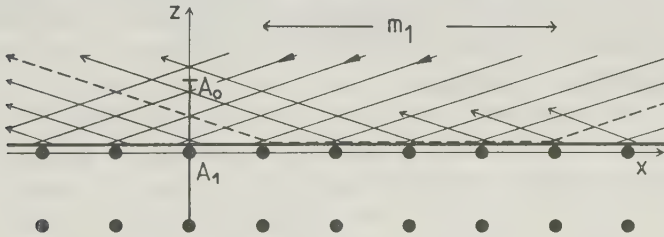


Abb.4.4 : Planare Oberflächengitterführung. Alle Trajektorien verlaufen wie das gestrichelte Beispiel. Geführte Strecken nahe der Oberfläche sind schematisch als gerade Linien dargestellt.

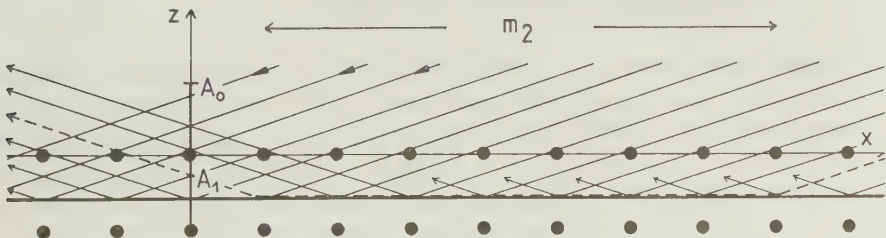


Abb.4.5 : Fokussierung und Reflexion im obersten Kanal. Alle Trajektorien verlaufen wie das gestrichelte Beispiel. Geführte Strecken sind schematisch als gerade Linien dargestellt.

4.2. Computersimulation

Neben der analytischen Beschreibung der Ionengitterführung [29,32,33] wurden seit Beginn der Untersuchung dieser Effekte mit Erfolg Computersimulationen zu ihrer Deutung herangezogen [41,42]. Der Grund für die Anwendbarkeit der Methode liegt darin, daß es sich bei der Gitterführung um die oftmalige Aneinanderreihung eines vergleichsweise einfachen Prozesses, nämlich der klassischen Streuung eines Projektils an einem Targetkern, handelt. Die Komplexität der Phänomene ergibt sich aus der Verkettung, nicht aus dem Einzelereignis. Mittels des Computers kann diese Abfolge Stoß für Stoß nachvollzogen werden, wogegen die analytische Rechnung von den einzelnen Stoßereignissen absehen und zu einer pauschalen Behandlung in Form von Ketten- und Ebenenpotentialen übergehen muß. Insbesondere ergibt sich damit in der Simulation die Möglichkeit den Einfluß vereinzelter "anomaler" Stöße (mit Defekten, Fremdatomen oder Adsorbaten) zu studieren.

In den folgenden Abschnitten ist der allgemeine, die Ionenstreuung bei Oberflächengitterführung betreffende Teil des Simulationsprogramms beschrieben, der sich an ähnlichen Programmen von [21,43] orientiert. Die speziell die SEE angehenden Erweiterungen sind in Abschnitt 5.5 zusammengestellt.

4.2.1 Berechnung der Projektiltrajektorien bei Gitterführung : Streuebenenkonzept und Binärstöße

Zur Bestimmung der Projektilbahnen im Simulationsmodell wird der Kristall in Streuebenen S_i unterteilt (Abb.4.6). Dies sind die Netzebenen des Kristalls, die auf der als Einschubrichtung gewählten niederindizierten Richtung $[hkl]$, die auch x-Achse im verwendeten Koordinatensystem ist, senkrecht stehen. Ihre jeweilige Belegung mit Targetatomen hängt von der Kristallstruktur ab. Da das Programm zur Beschreibung gittergeführter Projektile ausgelegt ist, werden nur solche Trajektorien verfolgt, deren Winkel ψ zur $[hkl]$ -Richtung kleiner als 25° ist :

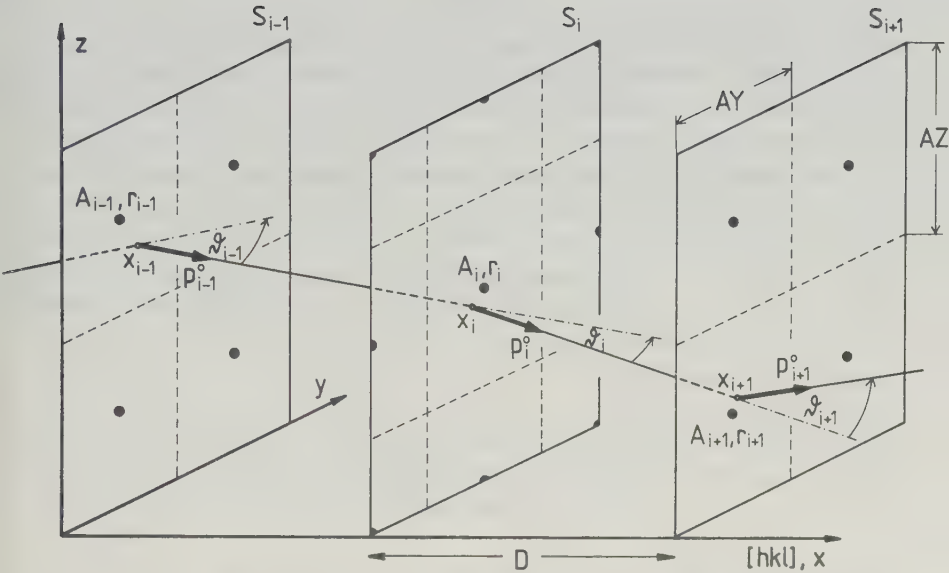


Abb.4.6 : Streuebeneneinteilung und gerechneter Bahnverlauf.

$$(4.15) \quad \cos \psi = p_1^0 \cdot e_x^0 = p_x^0 \geq \cos(25^\circ) \quad ,$$

$p^0 = (p_x^0, p_y^0, p_z^0)$: Impulseinheitsvektor Projektil ,

e_x^0 : x-Einheitsvektor .

Unter den für die Rechnungen gewählten Einschubbedingungen bleibt diese Forderung für viele Trajektorien (reflektierte Teilchen) auf ihrer ganzen Länge, für die restlichen auf den wesentlichen, oberflächennahen Abschnitten erfüllt. Somit werden die Streuebeneen erstens der Reihe nach durchflogen (...→ S_{i-1} → S_i → S_{i+1} →...) und zweitens schneidet jede Trajektorie eine bestimmte Streuebene S_i genau einmal. Das Projektil streut in jeder Streuebene S_i nur am dort jeweils nächstgelegenen Targetatom. Der Einfluß anderer Atome wird vernachlässigt (Binärstoßapproximation). Die Projektil-Targetatom-Wechselwirkung beschreibt ein Thomas-Fermi-Molière-Potential (4.1). Die gerechnete Flugbahn des Projektils verläuft zwischen den Streuebeneen gradlinig (als Asymptote der eigentlich gekrümmten Bahn). Der Knick der Bahn um den jeweiligen Binärstoß-Ablenkwinkel θ_i wird in die Streuebene S_i gelegt.

Damit kann sukzessive aus $\mathbf{x}_{i-1}$ und $\mathbf{p}_{i-1}^0$ in der Streuebene S_{i-1} der Trajektorienschnittpunkt $\mathbf{x}_i$ in S_i berechnet werden. Als Stoßpartner in S_i wählt man schließlich das Atom A_i (am Ort $\mathbf{r}_i$), das $\mathbf{x}_i$ am nächsten liegt und das sich aus der Kristallperiodizität bestimmen läßt. Der Stoßparameter q wird durch den Abstand $|\mathbf{r}_i - \mathbf{x}_i|$ (modifiziert durch thermische Gitterschwingungsamplituden, Abschnitt 4.2.3) angenähert. Für das Zentralpotential (4.1) verläuft die Bewegung beim Stoß an A_i in der von $\mathbf{p}_{i-1}^0$ und $\mathbf{s}_i^0 = (\mathbf{x}_i - \mathbf{r}_i)/|\mathbf{x}_i - \mathbf{r}_i|$ aufgespannten Ebene mit dem Normalenvektor $\mathbf{n}_i = \mathbf{p}_{i-1}^0 \times \mathbf{s}_i^0$ und $\mathbf{n}_i^0 = \mathbf{n}_i/|\mathbf{n}_i|$. Bei einem Streuwinkel θ_i gilt dann für $\mathbf{p}_i^0$ (Abb.4.7) :

$$\begin{aligned}
 (4.16) \quad \mathbf{p}_i^0 &= \cos\theta_i \cdot \mathbf{p}_{i-1}^0 + \sin\theta_i \cdot (\mathbf{n}_i^0 \times \mathbf{p}_{i-1}^0) = \\
 &= \cos\theta_i \cdot \mathbf{p}_{i-1}^0 - \sin\theta_i \cdot (\mathbf{p}_{i-1}^0 \cdot (\mathbf{s}_i^0 \times \mathbf{p}_{i-1}^0) - \mathbf{s}_i^0)/|\mathbf{n}_i| = \\
 &= \mathbf{p}_{i-1}^0 \cdot (\cos\theta_i - \sin\theta_i \cdot (\mathbf{s}_i^0 \cdot \mathbf{p}_{i-1}^0)/|\mathbf{n}_i|) + \mathbf{s}_i^0 \cdot \sin\theta_i/|\mathbf{n}_i| .
 \end{aligned}$$

Für kleine Streuwinkel θ_i hat man $\cos\theta_i \approx 1$, $\sin\theta_i \approx \theta_i \ll 1$ und aufgrund (4.15) folgt $|\mathbf{s}_i^0 \cdot \mathbf{p}_{i-1}^0| < \cos(90^\circ - 25^\circ) \approx 0,42$ und $1 \geq |\mathbf{n}_i| > \sin 65^\circ \approx 0,91$.

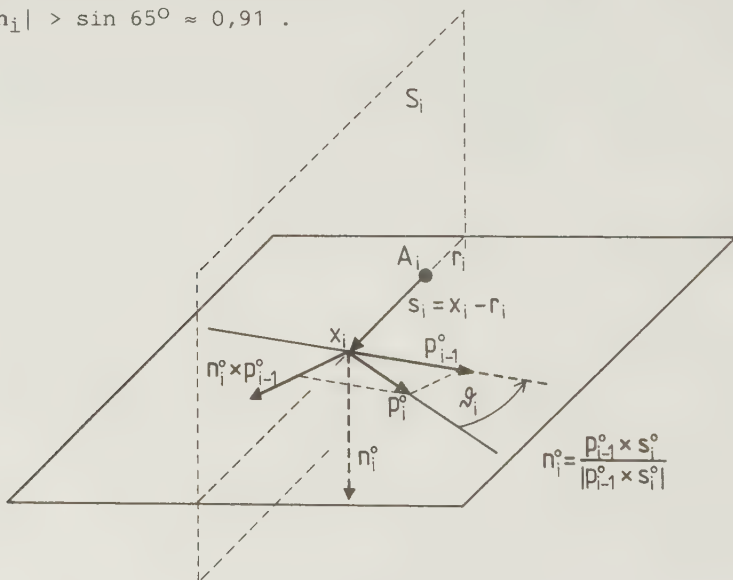


Abb.4.7 : Zur Herleitung von (4.16)-(4.18).

Das berechtigt zu der Näherung [44] :

$$(4.17) \quad \mathbf{p}_1^0 = \mathbf{p}_{1-1}^0 + \theta_i \cdot \mathbf{s}_1^0 .$$

Der Trajektorienschnittpunkt $\mathbf{x}_{i+1}$ mit der nächsten Streuebene S_{i+1} folgt dann aus :

$$(4.18) \quad (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i) = (D/\cos\psi) \cdot \mathbf{p}_1^0 \approx D \cdot \mathbf{p}_1^0 ,$$

$$\text{da } 1 \leq (1/\cos\psi) < 1,1 , \psi < 25^\circ .$$

Die Mehrzahl der Stöße findet mit $\psi \ll 25^\circ$ statt, so daß die Näherungen wesentlich besser ausfallen.

Der Streuwinkel θ_i wird in der Impulsnäherung [45] bestimmt. Für den Ablenkwinkel θ (im Laborsystem) in einem Zentralpotential $U(r)$ gilt demnach (für nicht zu große Winkel θ , so daß $\sin\theta \approx \theta$, $\cos\theta \approx 1$) :

$$(4.19) \quad \theta = -E^{-1} \cdot \frac{d}{dq} \int_0^\infty U(\sqrt{\xi^2 + q^2}) d\xi ,$$

und für das Thomas-Fermi-Molière-Potential (4.1) :

$$(4.20) \quad \theta = \frac{z_1 z_2 e^2}{E a_{tf}} \sum \alpha_i \beta_i K_1(\beta_i q / a_{tf}) ,$$

E : Projektilenergie ,

q : Stoßparameter ,

$K_1(x)$: mod. Besselfunktion 2.Art, 1.Ordnung [46].

Man verwendet die Impulsnäherung (4.19), da die Berechnung des exakten klassischen Streuwinkels [47] für das Potential (4.1) nur durch numerische Quadratur möglich ist, was bei der oftmaligen Wiederholung dieser Berechnung pro Trajektorie zuviel Rechenzeit erfordert. Ebenfalls aus Gründen der Rechenzeiteinsparung läßt sich (4.20) noch approximieren durch [45] :

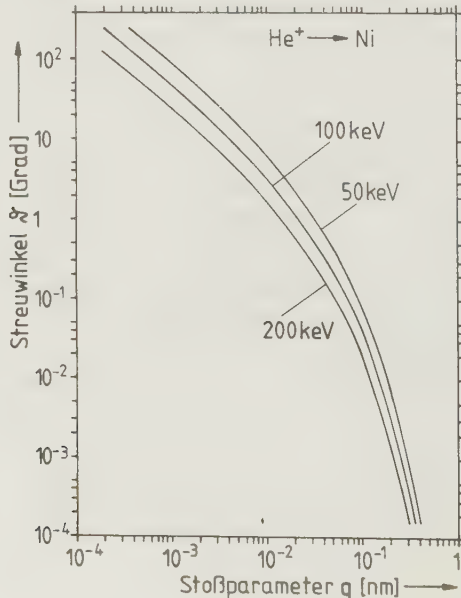
$$(4.21) \quad \theta = \frac{z_1 z_2 e^2}{E a_{tf}} \cdot \begin{cases} 1,01 \cdot a_{tf} / q \cdot \exp(-0,5q/a_{tf}) & \text{für } 10^{-3} \leq q/a_{tf} < 1,5 , \\ (0,03 \cdot |q/a_{tf} - 3,8| + 0,64) \cdot a_{tf} / q \cdot \exp(-0,3q/a_{tf}) & \text{für } 1,5 \leq q/a_{tf} \leq 30 . \end{cases}$$

Die Genauigkeit dieser Näherungen diskutieren [21,22]. Sie ist für gittergeführte Projektile (mit $\theta < 1^\circ$) ausgezeichnet, wogegen sie für die seltenen Großwinkelstöße unkritisch wird. Denn eine Großwinkelstreuung beendet in der Regel die axiale oder planare Führung und der weitere Bahnverlauf nimmt einen zufälligen Charakter an.

Die Rechtfertigung von Streuebeneneinteilung und Binärstoßnäherung liegt in der Tatsache, daß bei den zugrundegelegten Projektilenergien große Streuwinkel nur für sehr kleine Stoßparameter auftreten (Abb.4.8) :

So benötigt man zur Ablenkung eines 200 keV-He⁺-Ions um nur 1° einen Stoßparameter $q \approx 0,015 \text{ nm} \approx a_{\text{tf}}$. Dann aber beträgt die Entfernung zu anderen Atomen, als dem Stoßpartner, jedenfalls mehr als 0,1 nm, womit deren Einfluß um ein bis zwei Größenordnungen geringer ist. Bei Stößen mit großem Stoßparameter ($> 0,1 \text{ nm}$) können zwar durchaus mehrere Atome vergleichbar stark beteiligt sein, jedoch sind die Ablenkwinkel dann so gering ($< 0,1^\circ$), daß ihr genauer Betrag nicht mehr entscheidend ist, da das Teilchen fast gradlinig weiterfliegt.

Abb. 4.8



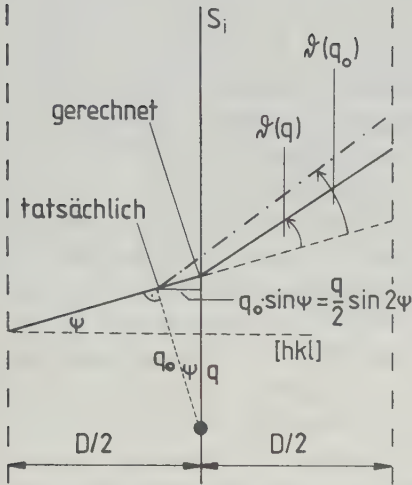


Abb. 4.9

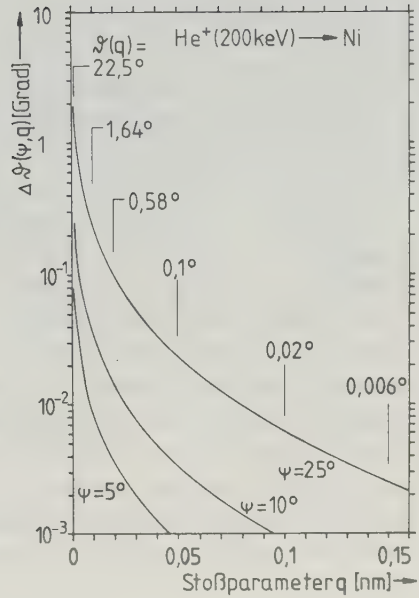


Abb. 4.10

Zu diskutieren bleibt noch die Näherung des tatsächlichen Stoßparameters q_0 durch q (Abb. 4.9). Dadurch entsteht ein Winkelfehler $\Delta \theta(q, \psi) = \theta(q) - \theta(q_0)$ sowie eine x-Versetzung der Knickpunkte der gerechneten und der wirklichen Trajektorie um $\Delta x = 0,5 \cdot q \cdot |\sin 2\psi|$. Für gittergeführte Ionen mit $\psi < 5^\circ$ und $q \lesssim 0,1$ nm ist $\Delta x < 8,6$ pm. Δx ist so vergleichbar oder kleiner als thermische x-Auslenkungen des Targetatoms und braucht damit wie diese nicht berücksichtigt zu werden (Abschnitt 4.2.3). Abbildung 4.10 zeigt die Winkelfehler $\Delta \theta(q, \psi)$ für verschiedene Werte von ψ in Abhängigkeit vom Stoßparameter q . Zur Orientierung sind auch diverse Streuwinkel $\theta(q)$ angegeben. Für kleine q (0,01 nm) wächst zwar $\Delta \theta$, aber auch θ , so daß der relative Fehler $\Delta \theta / \theta$ klein bleibt. Dies gilt besonders für realistische $\psi < 5^\circ$, denn $\psi = 25^\circ$ ist ja bereits die Abbruchgrenze. Bei großen Stoßparametern kann der relative Fehler durchaus beträchtlich werden. Dies ist wiederum unkritisch, wegen der sehr kleinen Absolutwerte von θ in diesen Fällen.

4.2.2. Energieverluste

Auf seinem Weg durch den Kristall verliert ein Projektil Energie. Man unterscheidet dabei den nuklearen Energieverlust $(-dE/ds)_n$ durch Energieübertrag vom Projektil an ein Targetatom bei einem Binärstoß und den elektronischen Energieverlust $(-dE/ds)_e$. Der nukleare Energieverlust ist für die leichten Projektile (H^+ , He^+) und die dagegen schweren Targetatome (Ni) gering. Er kann bei den vorkommenden Projektilenergien von 50-200keV gegenüber $(-dE/ds)_e$ vernachlässigt werden [48,49,50]. Das gilt umso mehr für die gittergeführten Trajektorien mit großen Stoßparametern, kleinen Streuwinkeln und entsprechend ebenfalls kleinen Energieüberträgen bei den Projektil-Targetatom-Stößen. Der elektronische Energieverlust $(-dE/ds)_e$ steht in engem Zusammenhang mit der Produktion von Sekundärelektronen. Er und seine Berücksichtigung in den Rechnungen wird daher gemeinsam mit dieser in Abschnitt 5.5 besprochen.

4.2.3. Realistische Kristallsimulation

Der Vergleich zwischen Experiment und Computersimulation an einem perfekten, starren Kristallgitter und ideal glatter Oberfläche fällt unbefriedigend aus. Reale Gegebenheiten müssen modellmäßig eingebaut werden.

Die Kristallatome schwingen thermisch mit Auslenkungen u um ihre Gleichgewichtslage. Die jeweiligen Stoßparameter sind daher zu modifizieren : $q = |\mathbf{r}_i - \mathbf{x}_i + \mathbf{u}_i|$ (Abschnitt 4.2.1). Die Auslenkungen können als gaußverteilt [51], unkorreliert [21] und statisch angenommen werden, letzteres da die Projektil-Targetatom-Wechselwirkungszeit $\tau_{ww} \approx D/v \approx 10^{-4} \tau_{th} \ll \tau_{th}$ (v : Projektilgeschwindigkeit; τ_{th} : Periode einer thermischen Gitterschwingung $\approx 2\pi/\omega_D$, ω_D : Debye-Frequenz [52])). Die Komponente u_x parallel $[hkl]$ kann unberücksichtigt bleiben. Denn auf ein längs der x -Achse geführtes Ion wirkt im Mittel nur das Kontinuum-Kettenpotential, das durch Auslenkungen u_x nicht verändert wird. Die mittleren Auslenkungen $\langle u_y \rangle$ und $\langle u_z \rangle$ ergeben sich im Debye-Modell in der Hochtemperaturnäherung zu [53] :

$$(4.22) \quad \langle u_y \rangle = \langle u_z \rangle = \left(\frac{3\hbar^2 T}{M k_B T_D^2} \right)^{1/2},$$

T_D : Debye-Temperatur, für Ni = $(400 \pm 10) \text{ K}$ [54,55] ,

k_B : Boltzmann-Konstante ,

M : Masse eines Kristallatoms ,

speziell für Ni und Raumtemperatur : $\langle u_{y,z} \rangle = 6,6 \text{ pm}$.

Die Näherung ist für $T > 300 \text{ K}$ bis auf 3% genau [22]. u berechnet sich durch Multiplikation von (4.22) mit normierten, gaußverteilten Zufallszahlen mit Standardabweichung 1 [56]. Für die obersten beiden Atomlagen werden Anisotropien ($\langle u_y \rangle \neq \langle u_z \rangle$) nach [57] berücksichtigt. Adsorbierte Sauerstoffatome können als auf den obersten Ni-Atomen "reitend" angesehen werden [21], haben also dieselben Auslenkungen wie diese.

Rechnungen mit einer ideal glatten Kristalloberfläche führen zu einer hohen Reflektivität, wie sie in den Versuchen aufgrund der vorhandenen Oberflächenrauigkeit (Abschnitt 3.2) bei weitem nicht gefunden wird. Eine einfache Möglichkeit zur Berücksichtigung der Oberflächenrauigkeit ist die Simulation von Aufwärtsstufen, die quer zur Einschubrichtung verlaufen. Dazu wird der Kristall alle $2s$ Stöße um eine Atomlage, entsprechend der Kristall- bzw. Oberflächenstruktur, aufgestockt. Bei den untersuchten Einschubrichtungen hat jede zweite Streuebene die gleiche Atombelegung. s bezieht sich auf diese doppelte Periode. Der Stufenabstand ("Terrassenbreite") ist folglich $2s \cdot D$. Diese Vorstellung hat sich bereits in einer Reihe von Rechnungen zu Oberflächengitterführungsexperimenten ausgezeichnet bewährt [11,39,58]. Ihr Modellcharakter darf selbstverständlich nicht übersehen werden. Während Stufen eine realitätsnahe Beschreibung der Kristalloberfläche erlauben, ist das Kristallinnere immer noch idealisiert.

In Abschnitt 6.2 soll für $\text{He}^+(200 \text{ keV}) \rightarrow \text{Ni}(110), [1\bar{1}2]$ auch der Einfluß von Volumendefekten zumindest abgeschätzt werden. Dazu wird ein Defektparameter $0 \leq d \leq 1$ vorgegeben. Man zieht dann jeweils eine gleichverteilte Zufallszahl r aus demselben Intervall. Ist $r < d$ wird der anstehende Binärstoß mit zufälligem Stoßparameter gerechnet.

4.2.4. Start- und Abbruchbedingungen, ausgegebene Streudaten

Für jedes Winkelpaar (Φ, Θ) werden im Programm meistens $N = 400$ Projektiltrajektorien berechnet. Der Startimpuls p_1^0 eines Teilchens folgt aus Φ und Θ , die Startkoordinaten z_1^0 und y_1^0 ($i=1, N$) werden so gewählt, daß eine gleichmäßige Bestrahlung einer 2-dimensionalen Einheitszelle der Oberfläche resultiert. Bei rekonstruierter oder adsorbatbedeckter Oberfläche ist eventuell eine veränderte Einheitszelle zu verwenden. Desgleichen müssen, bei der Simulation mit Oberflächenstufen, die N eingeschossenen Teilchen auch über eine Stufenperiode hinweg gleichmäßig verteilt starten, damit alle Anflugsituationen statistisch vertreten sind. Die Starthöhe z_1^0 über der Oberfläche genügt ($\approx 0,6$ nm, je nach Anflugsituation), um die Wechselwirkung von Projektil und Target beim Start noch auszuschließen.

Die Trajektorie eines gestreuten Teilchens wird nicht mehr weiter verfolgt, wenn die Starthöhe z_1^0 wiedererreicht ist. Ein bereits mehrfach erwähntes Abbruchkriterium besteht in der Forderung (4.15). Es ist ein Kompromiß, um einerseits die Gültigkeit der angewandten Näherungen weitgehend zu gewährleisten und um andererseits die Randombahn eines Teilchens, nach Überschreiten von Ψ_C , noch möglichst weit zu verfolgen. Weiterhin bricht die Rechnung ab, falls eine Projektilenergie von 5 keV oder ein Stoßparameter von $10^{-3} \cdot a_{tf}$ (vgl. (4.21)) unterschritten wird. Beides ist allerdings, verglichen mit dem Überschreiten von $\Psi = 25^\circ$, äußerst selten. Für Teilchen, die den Kristall nicht wieder verlassen, findet man danach mittlere Abbruchenergien von $E_{ex} \leq 40$ keV bei Einschub entlang einer niederindizierten Richtung und $E_{ex} \leq 80$ keV bei Randeinschub, sowie mittlere Abbruchtiefen $|z_{ex}|$ von $10 \text{ nm} \leq |z_{ex}| \leq 40 \text{ nm}$ unter der Oberfläche. Dies bedeutet, daß kein wesentlicher, oberflächennaher Teil einer Trajektorie abgeschnitten wird.

An Daten zur Ionenstreuung liefert das Programm die Zahl der Teilchen bzw. Ionen, die den Kristall wieder verlassen, sowie die Ionenflußdichteverteilung in den oberen Atomlagen. Die Streuausbeuten werden auch nach Austrittswinkeln Φ_{aus} zur Kristalloberfläche aufgelöst ausgegeben, um einen Vergleich mit den

reflektierten Ionen aus dem Experiment (Abschnitt 3.3) zu ermöglichen.

Die Wahrscheinlichkeit α^+ , daß ein Teilchen die Oberfläche als Ion verläßt (neutralisierte Projektile mißt der Faraday-Becher nicht), haben für streifenden Einfall von $\text{He}^+(200\text{keV})$ auf $\text{Ni}(110)$ Graser [21] und List [18] empirisch bestimmt. Demnach gilt :

$$(4.23) \quad \alpha^+ = \frac{0,6 \cdot (0,01 \cdot E_{\text{aus}}/\text{keV})^{3/2}}{1 + 0,6 \cdot (0,01 \cdot E_{\text{aus}}/\text{keV})^{3/2}} ,$$

E_{aus} : Energie, mit der gestreute Teilchen die Oberfläche verlassen .

Zur Erfassung der Ionenflußdichteverteilung legt man in die Streuebenen S_i ein feinmaschiges Raster (Rasterfeldbreite $\text{AY}/10$ bzw. $\text{AZ}/10$, Abb.4.6) und registriert durchtretende Teilchen gemäß ihrer Koordinaten y, z (modulo Gitterperiodizität) im entsprechenden Rasterfeld. Der Einschub auf eine einzige Oberflächeneinheit zelle und die Registrierung dieser Projektile in jeder (hinsichtlich der Atombelegung äquivalenten) Streuebene bringt aufgrund der Kristallperiodizität dasselbe Ergebnis, wie der Einschub über die gesamte Oberfläche und Registrierung des Flußes in nur einer Transversalebene. Bezug auf die Rasterfeldfläche und die einfallende Flußdichte ergibt die gewünschte normierte Flußdichteverteilung [22].

5. Ioneninduzierte Sekundärelektronenemission

5.1. Allgemeines und theoretische Ansätze

Bei der Sekundärelektronenemission durch schnelle Ionen an Festkörpern (insbesondere Metallen) handelt es sich um ein komplexes Problem. Das kommt daher, daß beispielsweise ein einfallendes Ion eine Energie von 100-200 keV anbietet, der größte Teil dieser Energie zur Anregung von Elektronen übertragen wird (elektronischer Energieverlust) und zur Elektronenemission jeweils nur eine Anregung um wenige eV (zur Überwindung der Austrittsarbeit ϕ) erforderlich ist. Damit sind eine Vielzahl von Mechanismen vorstellbar, die alle zur Produktion austrittsfähiger Elektronen (d.h. mit Energie über dem Vakuumniveau) beitragen. Eine fundierte Theorie erfordert zudem die quantenmechanische Behandlung dieser Vorgänge.

Bei den vorliegenden Projektilenergien braucht allerdings nur die kinetische SEE berücksichtigt werden, bei der die Energie der angeregten Elektronen aus der kinetischen Energie des einfallenden Ions stammt. Daneben ist die ebenfalls vorkommende Potentialemission [59,60] zu vernachlässigen, da sie erst für Projektilenergien von wenigen keV in Erscheinung tritt [61,62] und nur Ausbeuten von $\gamma_{\text{pot}} \approx 0,2$ Elektronen/Ion für He^+ und von $\gamma_{\text{pot}} \approx 0,02$ Elektronen/Ion für H^+ liefert [63,64].

Die einmal produzierten austrittsfähigen Elektronen können durch inelastische Wechselwirkung mit anderen Elektronen und mit den Ionenrümpfen Energie verlieren und soweit gebremst werden, daß ein Verlassen des Festkörpers unmöglich wird. Sie können aber dabei, je nach Startenergie, auch andere austrittsfähige Elektronen erzeugen, wobei wieder eine Vielfalt verschiedener Anregungsprozesse analog zur Anregung durch das Ion denkbar ist. Deren Wirkungsquerschnitte (bzw. die entsprechenden freien Weglängen) sind im allgemeinen energieabhängig, was den Elektronenaustritt weiter kompliziert, da schon die primär erzeugten Elektronen durch den unspezifischen Entstehungsvorgang keine

einheitliche Energie besitzen und sich diese im Laufe des Austritts noch ändert. Aufgrund solcher Kaskadenphänomene erfordert eine strenge Behandlung der SEE einen transporttheoretischen Ansatz [65,66,67]. So geht Schou [68] für ein halbumendliches Medium (für $x \geq 0$, Vakuum für $x < 0$) von folgender Boltzmann-Gleichung aus :

$$(5.1) \quad -\frac{v_x}{v} \frac{\partial G}{\partial x} - \frac{1}{v} \frac{\partial G}{\partial t} = v \cdot \int d\sigma(\mathbf{v}; \mathbf{v}', \mathbf{v}_e'', \mathbf{v}_t'') (G(\mathbf{x}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}, t) - G(\mathbf{x}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}', t) - \Sigma G_{e,i}(\mathbf{x}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}_e'', t) - G_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}_t'', t)) ,$$

- v : Atomdichte des Targetmaterials ;
 $d\sigma(\mathbf{v}; \mathbf{v}', \mathbf{v}_e'', \mathbf{v}_t'')$: Wirkungsquerschnitt ;
 $G(\mathbf{x}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}_0 dx$: mittlere Zahl von Elektronen, die zur Zeit t in dem Geschwindigkeitsintervall $[\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_0 + d\mathbf{v}_0]$ in der Tiefe $[\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x}]$ anzu-treffen sind, erzeugt durch ein Ion mit Geschwindigkeit $\mathbf{v}$, das zur Zeit $t=0$ bei $x=0$ war; v_x : x-Komponente von $\mathbf{v}$; $v = |\mathbf{v}|$;
 $G(\mathbf{x}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}', t) d\mathbf{v}_0 dx$: desgleichen, erzeugt durch das gestreute Ion mit neuer Geschwindigkeit $\mathbf{v}'$;
 $G_e(\mathbf{x}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}_e'', t) d\mathbf{v}_0 dx$: desgleichen, zusätzlich erzeugt durch eines von i (schnellen) Sekundärelektronen mit Geschwindigkeit $\mathbf{v}_e''$;
 $G_t(\mathbf{x}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}_t'', t) d\mathbf{v}_0 dx$: desgleichen, zusätzlich erzeugt durch ein Rückstoßtargetatom mit Geschwindigkeit $\mathbf{v}_t''$.

Der Beitrag G_t durch solche Targetatome, die durch einen Stoß des Projektils mit entsprechend hohem Energieübertrag ihre Gitterplätze verlassen und als Rückstoßatome durch den Kristall fliegen, wobei sie weitere Sekundärelektronen erzeugen, ist bei Systemen leichter Ionen und schwerer Targetatome bei den vorliegenden Energien zu vernachlässigen, da hier ausreichende Energieüberträge selten sind [15,69]. Dies lehrt auch ein Vergleich zwischen dem elektronischen und dem nuklearen Energieverlust (Abschnitt 4.2.2), der für die Entstehung von Rückstoßatomen verantwortlich ist [49]. Zudem ist der nukleare Energieverlust bei Ionengitterführung nochmals reduziert [22,33].

Der nach Elektronengeschwindigkeiten aufgelöste Sekundärelektronenfluß J durch die Oberfläche $x \equiv 0$ ergibt sich dann zu :

$$(5.2) \quad J(\mathbf{v}_0, \mathbf{v}) d\mathbf{v}_0 = |\mathbf{v}_{0x}| \cdot \int dt G(0, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}_0 \quad .$$

Die totale Sekundärelektronenausbeute γ pro Ion erhält man durch Integration über $\mathbf{v}_0$. Die näherungsweise Lösung der Gleichung (5.1), wobei u.a. einfache Modellwirkungsquerschnitte $d\sigma$ (Potenzgesetze) eingeführt werden, liefert den Ausdruck :

$$(5.3) \quad \gamma = \hat{D}(0, \mathbf{v}) \cdot \Lambda = D(0, E, \mathbf{e}) \cdot \Lambda \quad .$$

$\hat{D}(x, \mathbf{v})$ bzw. $D(x, E, \mathbf{e})$ bezeichnet die Energiedichte (pro Längeneinheit in x -Richtung), die durch ein einfallendes Ion mit Geschwindigkeit $\mathbf{v}$ bzw. Energie E und Einfallsrichtung $\mathbf{e}$, unter Berücksichtigung der Kaskade, in der Tiefe x in Form elektronischer Anregung deponiert wird. Λ ist, explizit ausgeschrieben, ein komplizierter Materialparameter [68], in den der Energieverlust der Elektronen am Weg zur Oberfläche eingeht und der eine Austrittsbarriere ϕ berücksichtigt. Mit Einführung einer Funktion $\beta(E, \mathbf{e})$ läßt sich die Verbindung zum elektronischen Energieverlust $(-dE/ds)_e$ des einfallenden Ions herstellen :

$$(5.4) \quad D(0, E, \mathbf{e}) = \beta(E, \mathbf{e}) \cdot (-dE/ds)_e \quad .$$

Für Energien > 50 keV pro atomare Masseneinheit ist β energieunabhängig und ≈ 1 , falls Rückstoßatome vernachlässigbar sind [68]. Das entspricht der experimentellen Tatsache [24,70], daß zwischen SEE-Ausbeute γ und $(-dE/ds)_e$ bei senkrechtem Einschub und polykristallinen Oberflächen annähernd Proportionalität besteht.

Obwohl diese Theorie einen systematisch befriedigenden Zugang zur Beschreibung der SEE darstellt und eine Reihe von Aussagen erlaubt (Energie- und Winkelverteilung austretender Elektronen), die gut mit Experimenten übereinstimmen [25,68], ist sie speziell für den Fall der SEE bei Oberflächengitterführung dennoch nicht anwendbar. Besonders stört dabei ihr Kontinuumscharakter. Die Berücksichtigung einer Kristall- und Oberflächenstruktur aus

diskreten Atomen und Atomketten, wie für die Gitterführung wesentlich, die Behandlung von individuellen Ionentrajektorien (z.B. mit Reflexion), von Inhomogenitäten, sowohl in der elektronischen Struktur des Targets, wie in der Flußdichteverteilung der Ionen und die Einführung stoßparameterabhängiger Wirkungsquerschnitte ist nicht möglich. Deshalb muß hier auf einfache phänomenologische Theorien zur SEE [61,70,71] zurückgegriffen werden, die die SEE als dreistufigen Prozeß beschreiben :

$$(5.5) \quad \gamma = P \cdot \int_{\text{Trajekt.}} \frac{dN_e(\mathbf{x}, E)}{ds} \cdot \eta(\mathbf{x}, \epsilon, \theta') ds \quad ,$$

- $\frac{dN_e(\mathbf{x}, E)}{ds}$: mittlere Zahl der von einem Projektil der Energie E am Ort $\mathbf{x}$ pro Weglänge erzeugter (austrittsfähiger) Elektronen ;
- $\eta(\mathbf{x}, \epsilon, \theta')$: Transportfunktion : Sie gibt an, wieviel austrittsfähige Elektronen pro am Ort $\mathbf{x}$ erzeugtes Elektron an der Oberfläche $z \equiv 0$ ankommen. Verlieren erzeugte Elektronen in der Kaskade ihre Austrittsfähigkeit (Energie unter Vakuumniveau), ist $\eta < 1$. Grundsätzlich können in der Kaskade aber auch neue austrittsfähige Elektronen produziert werden, also ist auch $\eta > 1$ möglich. η hängt von der Energie- und Emissionswinkelverteilung der bei $\mathbf{x}$ erzeugten Elektronen ab, was durch ϵ und θ' angedeutet wird.
- P : Proportionalitätsfaktor, der die Wahrscheinlichkeit eines austrittsfähigen Elektrons beschreibt, die Oberflächenbarriere tatsächlich zu überwinden. Dazu muß nicht nur seine Gesamtenergie, sondern auch sein Impuls senkrecht zur Oberfläche ausreichend groß sein. Eigentlich ist P keine Konstante, vielmehr ist es abhängig von der Energie- und Winkelverteilung der Elektronen an der Oberfläche .

In diesen empirischen Theorien sind drastische Näherungen üblich und zwar zuerst [61,71,72] :

$$(5.6) \quad dN_e/ds = (-dE/ds)_e / \epsilon_{ex} \quad .$$

Die Zahl der erzeugten (austrittsfähigen) Elektronen ist dem elektronischen Energieverlust des Projektils proportional. ϵ_{ex} ist eine mittlere Anregungsenergie. Für genügend hohe Projektilenergie ($E > 10$ keV) und senkrechten Einschuß bleibt die Energie E und damit $(-dE/ds)_e$ über die für die SEE bedeutsame Schicht an der Oberfläche fast konstant. So kann $(-dE/ds)_e$ vor das Integral (5.5) gezogen werden und man erhält wiederum die experimentell bekannte Proportionalität zwischen γ und $(-dE/ds)_e$. Es ist darauf hinzuweisen, daß die Auffassungen bei Schou in (5.3), (5.4) und in den phänomenologischen Theorien, trotz der in diesem Punkte gleichen Aussagen, verschieden sind: Bei Schou approximiert $(-dE/ds)_e$ eine Energiedichte D , die den Kaskadenprozeß bereits beinhaltet, während es hier einen Wirkungsquerschnitt primärer Elektronenerzeugung annähert.

Eine Proportionalität zwischen γ und $(-dE/ds)_e$, die gleichbedeutend mit einer konstanten mittleren Anregungsenergie ϵ_{ex} ist, ist keinesfalls trivial. So kann derselbe Energieverlust zur Anregung vieler Elektronen um einen geringen oder weniger Elektronen um einen hohen Betrag dienen. Für schnelle Ionen ($E > 100$ keV) geschieht die Verwendung eines konstanten $\epsilon_{\text{ex}} \approx 20\text{--}30$ eV unter Hinweis auf derartige Verhältnisse bei der Ionisation freier Atome in Gasen [70,71,73]. Experimentell besteht besagte Proportionalität bei verschiedenen Metallen noch bis herab zu Ionenenergien von 20 keV [70]. Eine gewisse Klärung bringen Rechnungen an einem freien Elektronengas im folgenden Abschnitt.

In einer systematischen Theorie wäre dN_e/ds aus den Wirkungsquerschnitten der Elektronenanregung der verschiedenen Schalen durch die schnellen Ionen zu bestimmen. Für die inneren Schalen, soweit sie für die SEE überhaupt relevant sind, können die Coulombionisationsquerschnitte [74] in Verbindung mit den jeweiligen Fluoreszenzausbeuten [06] dienen. Denn sowohl das primär angeregte Elektron, wie ein bei der Auffüllung der Schale eventuell erzeugtes Auger-Elektron kann zu dN_e/ds beitragen. Für die Valenzelektronen wäre eine quantenmechanische Theorie nötig, die die dielektrische Wechselwirkung dieser Elektronen mit dem einfallenden Ion berücksichtigt. Sei dazu nach [75]

$$(5.7) \quad \varrho(\mathbf{x}, t) = Z_1 e \cdot \delta(\mathbf{x} - \mathbf{v}t)$$

die Ladungsdichte des einfallenden Ions mit Geschwindigkeit $\mathbf{v}$ ($\mathbf{x}$: Ortskoordinate, t : Zeit, $Z_1 e$: Ladung). Die Fourierkomponenten $\hat{\Phi}(\mathbf{k}, \omega)$ des Störpotentials $\Phi(\mathbf{x}, t)$ (bei periodischen Randbedingungen mit Periodizitätsvolumen V , räumlich homogenes Medium) hängen mit den Fourierkomponenten $\hat{\varrho}(\mathbf{k}, \omega)$ von $\varrho(\mathbf{x}, t)$ zusammen (Laplace-Gleichung) :

$$(5.8) \quad \hat{\Phi}(\mathbf{k}, \omega) = 4\pi \hat{\varrho}(\mathbf{k}, \omega) / (k^2 \cdot \epsilon(\mathbf{k}, \omega)) .$$

$\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$ ist die Dielektrizitätskonstante. Für $\Phi(\mathbf{x}, t)$ folgt :

$$(5.9) \quad \Phi(\mathbf{x}, t) = \frac{4\pi Z_1 e}{V} \sum_{\mathbf{k}, \omega} \frac{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{v}, \omega} \cdot e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}}{k^2 \cdot \epsilon(\mathbf{k}, \omega)} .$$

Damit kann störungstheoretisch die gesuchte Anregungswahrscheinlichkeit vom besetzten Zustand $|\mathbf{k}_0\rangle$ in den unbesetzten Zustand $|\mathbf{k}_1\rangle$ (über dem Fermi-niveau) und dann weiter dN_e/ds ermittelt werden. Das zugehörige Matrixelement $\langle \mathbf{k}_0 | \Phi | \mathbf{k}_1 \rangle$ zeigt, daß für eine genaue Auswertung Bandstruktur und Wellenfunktionen der Valenzelektronen bekannt sein müssen, auch schon zur Bestimmung von $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$. In unserem Fall wären zusätzlich Oberflächeneffekte zu berücksichtigen.

Die zweite Näherung der phänomenologischen Theorien bezieht sich auf die Transportfunktion η [61, 71, 72, 73] :

$$(5.10) \quad \eta \sim \exp(-|z|/L) .$$

Die Austrittswahrscheinlichkeit hängt so nur mehr von der Entstehungstiefe $|z|$ eines Elektrons unter der Oberfläche ab. Der Ausdruck ist eher als mathematische Approximation der komplizierten Funktion η mit einem Parameter L zu betrachten, denn als Beschreibung eines speziellen physikalischen Dämpfungsmechanismus. So bekommt L nur formal die Bedeutung einer effektiven freien Weglänge. Einige weitere Ausführungen folgen im Abschnitt 5.4.

Die Anwendung der phänomenologischen Theorie und ihr Einbau in die Computersimulation der Oberflächengitterführung ist offensichtlich :

$$(5.11) \quad \gamma \sim \sum (\Delta N_e)_i \cdot \exp(-|z_i|/L) \quad .$$

Dabei ist $(\Delta N_e)_i$ die Zahl der beim i-ten Stoß in der Tiefe z_i erzeugten Elektronen und es ist über die i Binärstöße einer berechneten Trajektorie zu summieren. Dazu ist (dN_e/ds) in geeigneter Weise stoßparameterabhängig darzustellen (Abschnitt 5.5), wofür es Beispiele in der Behandlung des elektronischen Energieverlusts bei Ionengitterführung gibt [48,76] .

5.2. Das freie Elektronengas als instruktives Beispiel

Der mit (5.7)-(5.9) skizzierte Weg zur Bestimmung von (dN_e/ds) unter Berücksichtigung der dielektrischen Wechselwirkung wurde von Brice und Sigmund [75] für ein entartetes Elektronengas mit

$$(5.12) \quad |k_m\rangle = \exp(i(k_m x - \omega_m t)) \quad , \quad m = 0, 1 \quad ,$$

$$\omega_m = E_m/\hbar \quad , \quad E_m : \text{Energieeigenwert zu } |k_m\rangle \quad ,$$

und unter Zugrundelegung der Lindhardschen Dielektrizitätsfunktion $\epsilon(k, \omega)$ beschrritten. Diese lautet bei Einführung der Koordinaten

$$(5.13) \quad u = \omega/(k v_F) \quad \text{mit } k = |k| \quad ,$$

$$z = k/(2k_F) \quad ,$$

$$\chi^2 = e^2/(\pi \hbar v_F) = v_0/(\pi v_F) \quad (\text{Elektronendichteparameter}),$$

mit v_F : Fermigeschwindigkeit

k_F : Fermiimpuls , $k_F = (m v_F)/\hbar$

E_F : Fermienergie , $E_F = (m v_F^2)/2 = \hbar^2 (3\pi^2 n_e)^{2/3} / (2m)$

m : Elektronenmasse

v_0 : Bohrsche Geschwindigkeit , $v_0 = e^2/\hbar$

n_e : Dichte des Elektronengases

e : Elementarladung

$$(5.14) \quad \epsilon(k, \omega) = 1 + \chi^2 (f_1(u, z) + i f_2(u, z)) / z^2 \quad ,$$

$$\text{mit } f_1(u, z) = \frac{1}{2} + \frac{1}{8z} ((1-(z+u)^2) \ln \left| \frac{z+u+1}{z+u-1} \right| + (1-(z-u)^2) \ln \left| \frac{z-u+1}{z-u-1} \right|),$$

$$f_2(u, z) = \begin{cases} \pi u/2 & \text{für } |z+u| < 1 \\ \pi(1-(z-u)^2)/(8z) & \text{für } |z-u| < 1 < |z+u| \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}.$$

Vorausgesetzt wird, daß Energie- und Impulsverluste des einfallenden Ions vernachlässigt und seine Geschwindigkeit v als konstant angesehen werden können, also (5.7).

Obzwar nicht zu erwarten ist, daß sich die Ergebnisse für das freie Elektronengas auf die ioneninduzierte SEE beim Übergangsmetall Ni übertragen lassen, erweist sich eine numerische Auswertung der von [75] angegebenen Anregungswahrscheinlichkeit als instruktiv für das Verständnis der ioneninduzierten SEE. So kann im Vergleich mit dem Lindhardschen Energieverlust [77] eines Ions beim Durchgang durch ein freies Elektronengas eine kritische Beurteilung der Annahme (5.6) der phänomenologischen Theorie vorgenommen werden, die ja unabhängig von der speziellen Elektronenstruktur eines Targetmaterials angewandt wird.

Die Anzahl der pro Weglänge in einen Endzustand aus $[k_1, k_1 + dk_1]$ ($k_1 > k_F$) angeregten Elektronen lautet demnach [75]:

$$(5.15) \quad dn(k_1) = \frac{(Z_1 e \chi)^2}{mv^2} k_1 dk_1 \int \int \frac{z dz du}{|z^2 \epsilon(z, u)|^2}$$

mit den Integrationsgrenzen: $uz \geq 0, 25 \cdot (k_1^2/k_F^2 - 1)$
 $u+z \leq k_1/k_F$
 $u \leq v/v_F$.

dN_e/ds ergibt sich durch weitere Integration über k_1 . Hierbei soll eine Verallgemeinerung gegenüber der Rechnung von [75] vorgenommen werden, die es erlaubt, die Zahl der austrittsfähigen Elektronen (dN_e/ds) $\epsilon \geq \epsilon_{\min}$ zu ermitteln, deren Anregungsenergie eine Barriere $\epsilon_{\min} > 0$ über E_F übersteigt:

$$(5.16) \quad \epsilon = E_1 - E_F > \epsilon_{\min} = E_{\min} - E_F,$$

$$(5.17) \quad E_{\min} = \hbar^2 k_{\min}^2 / (2m).$$

Dies führt zu einer Modifikation des Integrationsgebiets im (u, z, k_1) -Raum.

$$(5.18) \quad \left(\frac{dN_e}{ds} \right)_{\epsilon \geq \epsilon_{\min}} = \frac{(Z_1 e \chi)^2}{mv^2} \int \int \frac{dudz}{z^3 |\epsilon(u, z)|^2} \int_{\max(k_{\min}, k_F(u+z))}^{k_F \sqrt{1+4uz}} k_1 dk_1 =$$

$$\begin{aligned} & |u-z| < 1 \\ & uz \geq 0,25 \cdot (k_{\min}^2/k_F^2 - 1) \\ & 0 \leq u \leq v/v_F \end{aligned}$$

$$= \frac{(Z_1 e \chi k_F)^2}{2mv^2} \int \int_{\substack{u+z < \sqrt{1+\epsilon_{\min}/E_F} \\ |u-z| < 1 \\ uz \geq 0,25 \cdot (k_{\min}^2/k_F^2 - 1) \\ u \leq v/v_F}} dudz \frac{4uz - \epsilon_{\min}/E_F}{z^3 |\epsilon(u, z)|^2} - \frac{(2Z_1 e k_F)^2}{\pi mv^2} \int \int_{\substack{u+z > \sqrt{1+\epsilon_{\min}/E_F} \\ |u+z| < 1 \\ u \leq v/v_F}} dudz \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\epsilon(u, z)} - 1 \right)$$

Ist $\epsilon_{\min} = 0$, läßt sich auch das erste Integral weiterverarbeiten und man findet den Ausdruck von Brice und Sigmund :

$$(5.19) \quad \left(\frac{dN_e}{ds} \right)_{\epsilon \geq 0} = - \frac{(2Z_1 e k_F)^2}{\pi mv^2} \operatorname{Im} \int_0^\infty dz \int_0^{v/v_F} du \left(\frac{1}{\epsilon(u, z)} - 1 \right) .$$

Für kleine Projektilgeschwindigkeiten $v \ll v_F$ kann man entwickeln :

$$(5.20) \quad \left(\frac{dN_e}{ds} \right)_{\epsilon \geq 0} \approx \frac{m(Z_1 e)^2}{2\hbar^2 a^2} \left(\frac{\chi}{a} \arctg \frac{a}{\chi} - \frac{\chi^2}{a^2 + \chi^2} \right)$$

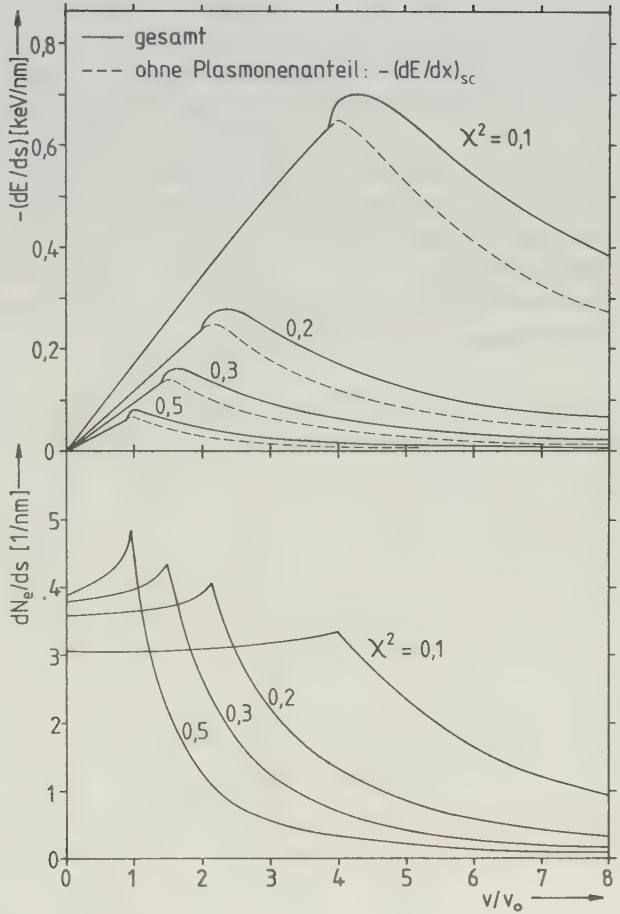
mit $a^2 = 1 - \chi^2/3$.

Für verschiedene χ^2 ergibt sich (bei Protonen $Z_1 = 1$) :

χ^2	0,1	0,2	0,3	0,5
$(dN_e/ds)_{\epsilon \geq 0} [\text{nm}^{-1}]$	3,04	3,54	3,72	3,75

Für dieselben χ^2 ist (5.19) numerisch ausgewertet in Abbildung 5.1 unten dargestellt. Wie bei allen Abbildungen des Abschnitts ist $Z_1 = 1$ gesetzt. Darüber der Energieverlust des Ions im freien Elektronengas nach Lindhard [77].

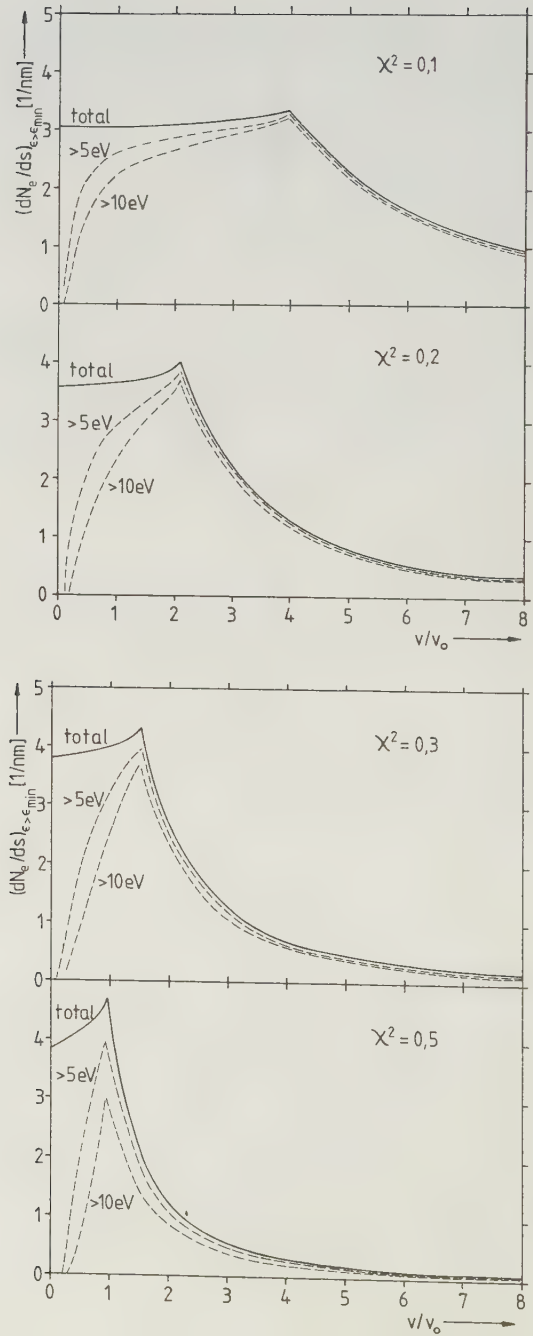
Abb.5.1 : Energieverlust und Elektronenproduktion in einem homogenen freien Elektrogas für verschiedene Elektronengasdichte (Parameter χ^2) für Protonen. v ist die Projektilgeschwindigkeit, v_0 die Bohrsche Geschwindigkeit.



Dieser steigt für $v \ll v_F$ bekanntlich linear mit v an, wogegen (5.20) v -unabhängig ist. Man hat also in diesem Geschwindigkeitsbereich (der, wie Abbildung 5.1 zeigt, sogar bis $v \approx v_c$ reicht, wobei v_c die Projektilgeschwindigkeit ist, ab der Plasmonen erzeugt werden können [77,75]) keine Proportionalität zwischen $(dN_e/ds)_{\epsilon \geq 0}$ und $(-dE/ds)$, mithin keine konstante mittlere Anregungsenergie ϵ_{ex} .

Erst bei Einführung einer Barriere $\epsilon_{min} > 0$ entnimmt man der Auswertung von (5.18) in Abbildung 5.2 für $\chi^2 \geq 0,2$ einen dem

Abb.5.2 : Elektro-
nenproduktion durch
Protonen ($Z_1=1$) bei
vorgegebener Bar-
riere $\epsilon_{\min} > 0$.



Energieverlust ähnlichen Anstieg von $(dN_e/ds)_{\epsilon \geq \epsilon_{\min}}$. Bei sehr kleinen Geschwindigkeiten $v < \epsilon_{\min}/(2mv_F)$ [75] langt der maximal mögliche Energieübertrag nicht aus, ein Elektron über $E_F + \epsilon_{\min}$ anzuheben. Man hat keine SEE.

Die der mittleren Anregungsenergie entsprechenden Quotienten $(-dE/ds)/(dN_e/ds)_{\epsilon \geq \epsilon_{\min}}$ sind in Abbildung 5.3 aufgetragen. Es wird deutlich, weshalb die SEE beim Freie-Elektronen-Metall Al ($\chi^2 = 0,34$) für $10 \text{ keV} < E < 50 \text{ keV}$ ungefähr proportional dem elektronischen Energieverlust ist [70]. Man sieht aber auch, mit welchen Vorbehalten (5.6) als allgemein gültige Beziehung zu betrachten ist.

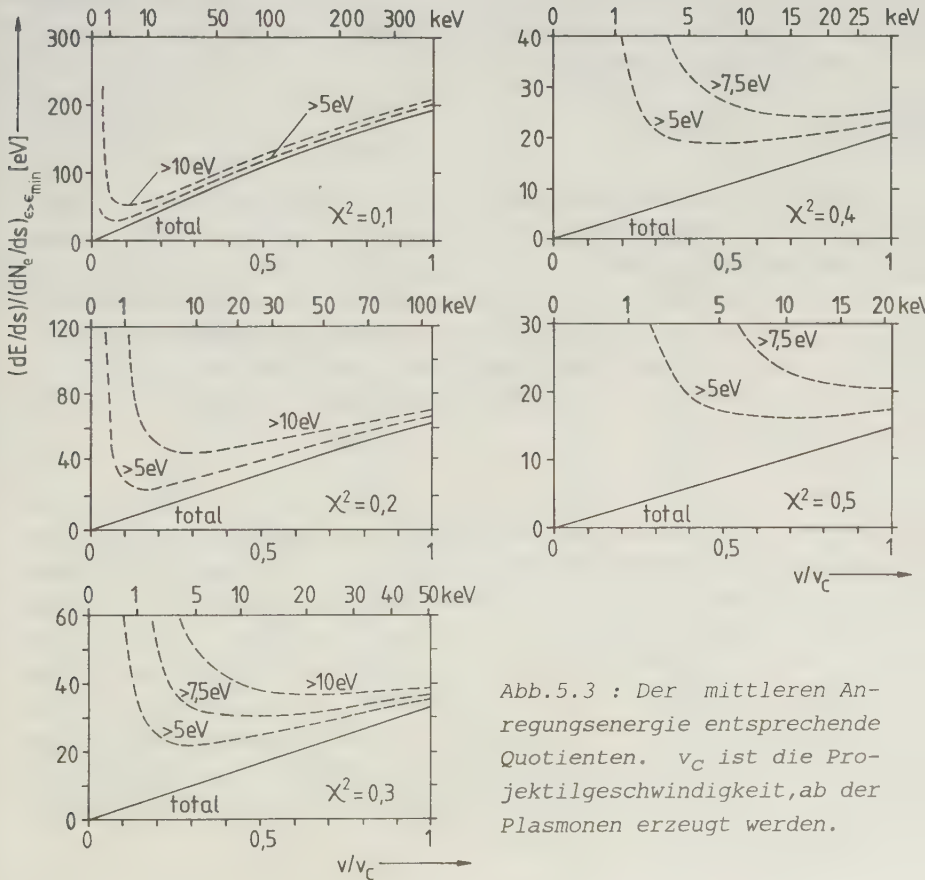


Abb.5.3 : Der mittleren Anregungsenergie entsprechende Quotienten. v_c ist die Projektilgeschwindigkeit, ab der Plasmonen erzeugt werden.

Das gilt auch für die höheren Projektilenergien $v > v_C$. Der Energieverlust enthält hier einen Anteil aus Einzelelektronenanregung $(-dE/ds)_{SC}$ und einen Plasmonenteil $(-dE/ds) - (-dE/ds)_{SC}$, und zwar gilt nach Lindhard näherungsweise :

$$(5.21) \quad \left(-\frac{dE}{ds}\right) \sim \frac{n_e}{v^2} \left(\ln \frac{\sqrt{3} v}{\chi v_F} \right)^2 + \frac{3}{5} \left(\frac{v}{v_F} \right)^{-2} - \dots$$

Dieses Ergebnis wird durch Integration des Plasmonenzweiges und unter Anwendung der Äquipartitionsregel erhalten [77]. Dieser Kunstgriff ist bei (dN_e/ds) mangels Plasmonenzweig nicht möglich. Infolgedessen fehlt bei Brice und Sigmund eine analytische Näherung für den Bereich $v > v_C$. Die hier gewonnenen numerischen Resultate lassen sich aber gut analytisch zusammenfassen, und zwar (Abb.5.4) :

$$(5.22) \quad (dN_e/ds)_{v > v_C} \sim v^{-2} .$$

Energieverlust und Elektronenproduktion verhalten sich im Bereich hoher Geschwindigkeiten v qualitativ ähnlich, eine strenge Proportionalität liegt jedoch nicht vor ((5.21), (5.22) und Abb.5.5). Betrachtet man allerdings die Energieskala in Abbildung 5.5, erkennt man, daß sich $(-dE/ds)_{SC}/(dN_e/ds)$ über vergleichsweise große Energiebereiche doch nur wenig, d.h. um einige eV, ändert. Darüberhinaus sind Einschränkungen von (5.6) zu erwarten.

Zuletzt ist in den Abbildungen 5.6 und 5.7 $(-dE/ds)$ und (dN_e/ds) bei fester Projektilenergie in Abhängigkeit von der Dichte n_e des Elektronengases gezeigt. In dieser Auftragung liegt der Bereich, wo auch Plasmonen erzeugt werden, bei Dichten n_e , die kleiner als eine kritische Dichte $n_{e,C}$ sind. Für $v/v_0 = 1,5$ liegt $n_{e,C}$ mit $n_{e,C} \approx 320 \text{ nm}^{-3}$ im dargestellten Dichtebereich, für $v/v_0 = 1$ unterhalb von $n_e = 100 \text{ nm}^{-3}$, für $v/v_0 = 6$ oberhalb von $n_e = 10^4 \text{ nm}^{-3}$. Der ausgewählte n_e -Bereich in den Abbildungen 5.6 und 5.7 ist gerade für eine mögliche Beschreibung der Ni-Valenzelektronen im lokalen Dichtemodell (Abschnitt 5.5) von Interesse.

Abb.5.4 : Elektro-
nenproduktion bei
hohen Geschwindig-
keiten ($Z_1 = 1$).

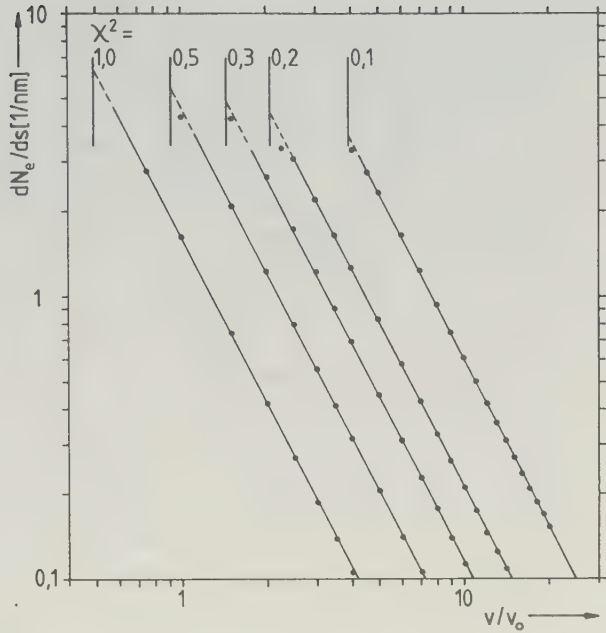
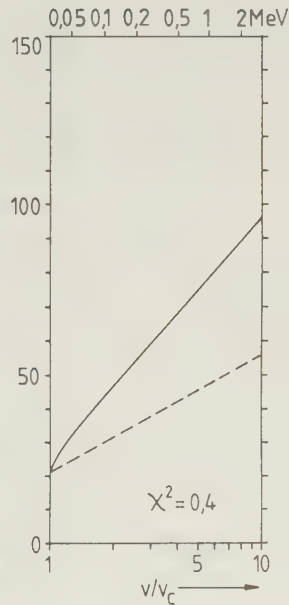
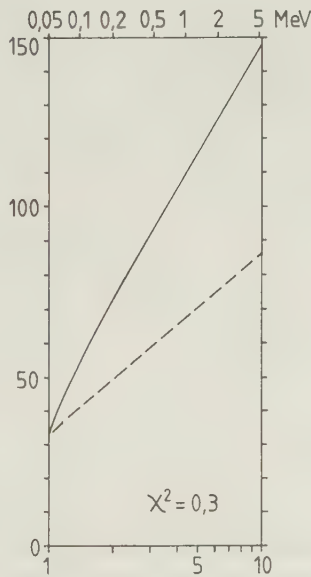
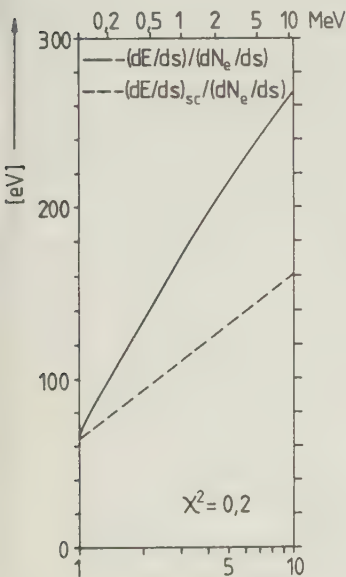


Abb.5.5 (unten) :
Der mittleren An-
regungsenergie ent-
sprechende Quoten-
ten, gebildet mit
dem Gesamtenergie-
verlust (dE/ds) und
mit dem Energiever-
lust durch Einzel-
elektronenanregung
(dE/ds)_{sc} ohne Plas-
monen.



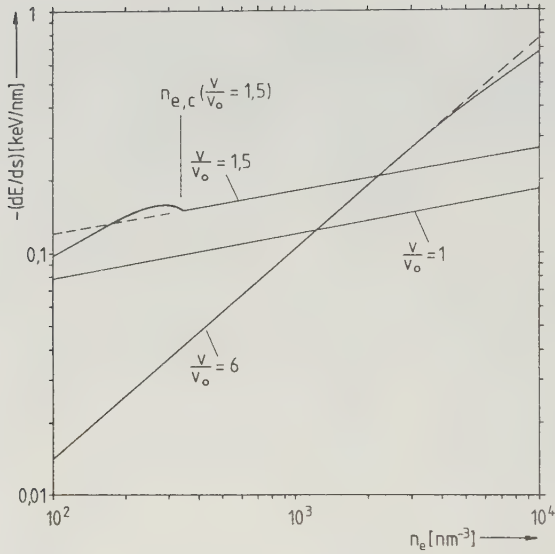


Abb.5.6 : n_e -Abhängigkeit des Energieverlusts ($Z_1 = 1$).

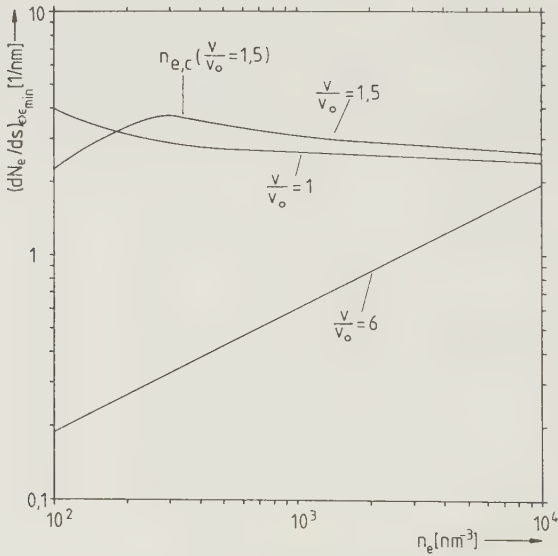


Abb.5.7 : n_e -Abhängigkeit der Zahl. erzeugter Sekundärelektronen pro Weglänge (vorgegebene Barriere $\epsilon_{min} = 7,5$ eV, $Z_1 = 1$).

Für $n_e < n_{e,c}$ und $n_e > n_{e,c}$ läßt sich sowohl $(-dE/ds)$ als auch (dN_e/ds) jeweils gut durch ein Potenzgesetz n_e^λ wiedergeben bzw. annähern. Im Bereich $n_e > n_{e,c}$, wo die Projektilgeschwindigkeit v kleiner als die entsprechende Fermigeschwindigkeit v_F bleibt, ist die n_e -Abhängigkeit nur schwach ($0 < \lambda \ll 1$), insbesondere im Fall (dN_e/ds) , wo man sogar eine leicht gegenläufige Tendenz feststellt : In einem dünneren Elektronengas werden mehr Elektronen produziert. Dies ist eine Auswirkung der dielektrischen Wechselwirkung zwischen Ion und Elektronengas. Für $v < v_F$ können die Elektronen der Ionenbewegung folgen, was zu starker Abschirmung und zur Veränderung der (ungestörten) Elektronendichte um das Ion führt [80,81,82]. Für hohe Projektilgeschwindigkeiten ($v/v_0 = 6$) findet man für $(-dE/ds)$ n_e -Proportionalität ($\lambda \approx 1$), gemäß (5.21), da χ unter dem Logarithmus nur schwach eingeht. Für (dN_e/ds) ergibt sich $\lambda \approx 0,5$, also immer noch keine n_e -proportionale Elektronenproduktion.

5.3. Valenzelektronen und innere Schalen bei Ni

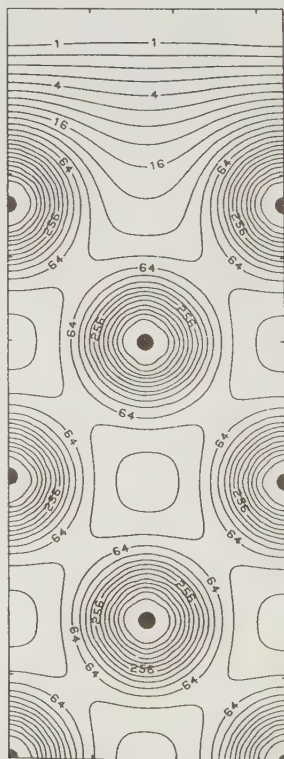
Ein freies Ni-Atom besitzt acht 3d- und zwei 4s-Elektronen [89]. In einem Ni-Kristall besetzen die entsprechenden Elektronen die Valenzbänder. Wie Bandstrukturrechnungen zeigen [84,85,86,91], tritt bei diesen s-d Hybridisierung auf, so daß eine weitere Unterscheidung von 3d- und 4s-Elektronen nicht mehr möglich ist.

Eine LCAO-Rechnung von Wang und Freeman [85,86,91] (Abb.5.8) vermittelt einen Eindruck von der räumlichen Valenzelektronendichteverteilung an einer Ni-Oberfläche.

Abb.5.8 : Valenzelektronendichteverteilung aus [85] für Ni in der (010)-Ebene, senkrecht zu einer (001)-Oberfläche.

Werte in $0,001 \text{ Elektronen}/a_0^3$ (a_0 : Bohrscher Radius), Verhältnis benachbarter Höhenlinien $=\sqrt{2}$.

Die Breite des Ausschnitts beträgt $0,352 \text{ nm}$.



Zu einem vergleichbaren Ergebnis kommt auch Arlinghaus [87]. Demnach steigt die Valenzelektronendichte n_e mit kleiner werdendem Abstand r zum jeweils nächstliegenden Ni-Kern im Bereich $0,02 \text{ nm} < r < 0,1 \text{ nm}$ annähernd radialsymmetrisch an. In Abbildung 5.9 sind die Werte der Valenzelektronendichte $n_e(r)$, wie man sie aus Abbildung 5.8 entnimmt, gegen r aufgetragen (Punkte). Gleichfalls aufgetragen ist die mittlere 3d-Elektronendichte $n_{3d}(r)$ beim freien Ni-Atom im Abstand r vom Kern (durchgezogene Linie). Die Werte sind einer Hartree-Fock-Slater-Rechnung entnommen [88]. Im Bereich $0,02 \text{ nm} < r < 0,1 \text{ nm}$ läßt sich $n_{3d}(r)$ approximieren durch

$$(5.23) \quad n_{3d}(r) \sim \exp(-64,2 \cdot r/\text{nm}) ,$$

n_{3d} : 3d-Elektronendichte beim freien Ni-Atom,
 r : Abstand zum Ni-Kern, $0,02 \text{ nm} < r < 0,1 \text{ nm}$.

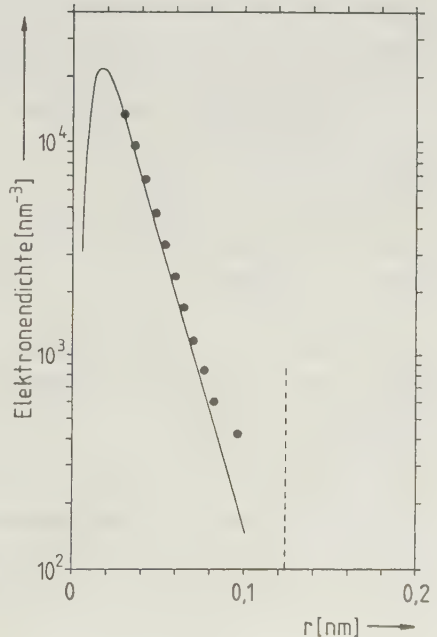
Für $r < 0,02 \text{ nm}$ durchläuft $n_{3d}(r)$ ein Maximum und sinkt dann ab. Für $0,02 \text{ nm} < r < 0,08 \text{ nm}$ verlaufen $n_{3d}(r)$ und $n_e(r)$ im Kristall ähnlich und für $0,08 \text{ nm} < r < 0,12 \text{ nm}$ liegt $n_e(r)$ über $n_{3d}(r)$.

Abb.5.9 :

Punkte : Valenzelektronendichte $n_e(r)$ als Funktion des Abstands r aus Abb.5.8;

Linie : 3d-Elektronendichte $n_{3d}(r)$ beim freien Ni-Atom als Funktion des Abstands r (nach [88]).

Bei $r = 0,12 \text{ nm}$ wird im Kristall der Rand der Wigner-Seitz-Zelle erreicht.



Die Valenzzustände liegen energetisch im Bereich von der Fermienergie bis etwa 8 eV darunter [83,84,85]. Damit ist die Bindungsenergie der Valenzelektronen deutlich niedriger als bereits die der 3p-Elektronen mit 68 eV (dann 3s: 112 eV, 2p: 855 eV und 872 eV, 2s: 1008 eV, 1s: 8333 eV) [96] und man kann vermuten, daß die Valenzelektronen für den überwiegenden Teil der ioneninduzierten SEE verantwortlich sind [68,70].

Die Ausbeute γ_{3sp} von Elektronen aus den 3s- und 3p-Orbitalen läßt sich zum Vergleich in folgender Weise abschätzen :

Der Ionisationswirkungsquerschnitt $\sigma_{I,3sp} = \sigma_{I,3s} + \sigma_{I,3p}$ dieser Ni-Orbitale liegt für Protonen mit Energien von 50 keV bis 150 keV zwischen $0,7 \cdot 10^{-3} \text{ nm}^2$ und $1,1 \cdot 10^{-3} \text{ nm}^2$ (die entsprechenden Werte der anderen Schalen : L: $4,5 \cdot 10^{-6} - 4 \cdot 10^{-7} \text{ nm}^2$, K: $4 \cdot 10^{-12} - 7 \cdot 10^{-16} \text{ nm}^2$) [74]. Bei einem Ni-Polykristall beträgt so die Zahl an 3sp-Ionisationen pro Wegstrecke und pro Ion : $\sigma_{I,3sp} \cdot \nu_{Ni} = 0,06 - 0,1 \text{ nm}^{-1}$. ν_{Ni} ist die Atomdichte von Ni, $\nu_{Ni} = 91,3 \text{ nm}^{-3}$ [49]. Nimmt man weiter an, daß

- pro Ionisation 2 austrittsfähige Elektronen entstehen, nämlich eines durch die Ionisation selbst und ein zweites durch einen Auger-Prozeß, der das Loch im 3s- bzw. 3p-Orbital auffüllt;
- bei Einschub senkrecht zur Oberfläche aus einer Schicht der Dicke $L \approx 1 \text{ nm}$ (vgl. inelastische freie Weglängen [72,97]) die Hälfte aller so produzierten Elektronen ungehindert austritt (die andere Hälfte läuft in entgegengesetzter Richtung ins Volumen [70]);
- jedes dieser Elektronen beim Austritt zusätzlich ein neues austrittsfähiges Elektron erzeugt,

dann resultiert $\gamma_{3sp} = 2 \cdot 0,5 \cdot 2,1 \text{ nm} \cdot \sigma_{I,3sp} \cdot \nu_{Ni} < 0,2$ Elektronen/Ion. Experimentell mißt man für Protonen der betrachteten Energie bei senkrechtem Einschub auf eine Cu-Polykristalloberfläche (was einen sehr ähnlichen Wert für Ni erwarten läßt [61]) eine totale SEE-Ausbeute von $\gamma = 1,5$ Elektronen/Ion [25]. Damit beträgt $\gamma_{3sp}/\gamma < 13\%$, selbst bei obiger großzügiger Abschätzung von γ_{3sp} .

Bei Einschub unter Gitterführungsbedingungen sinkt die Bedeutung der 3sp-Ionisation für die SEE weiter, da dann bevorzugt große Stoßparameter auftreten.

Die adiabatischen Radien [98] der einzelnen Nickel-Orbitale

$$(5.24) \quad r_{\text{ad}} = \sqrt{\hbar/I} \quad ,$$

v : Projektilgeschwindigkeit ,
 I : Bindungsenergie ,

betragen nämlich zum Beispiel für $\text{He}^+(200\text{keV})$:

Orbital	1s	2s	2p	3s	3p	(3d)	(4s)
$r_{\text{ad}}[\text{pm}]$	0,25	2,0	2,4	18,4	30,4	(510)	(510)

In Abbildung 5.10 sind Stoßparameterverteilungen dargestellt, wie sie sich in den Computersimulationen zu entsprechenden Einschußbedingungen ergeben. Man sieht, daß auch bei Randomeinschuß und in tieferen Atomlagen die kleinen Stoßparameter $q < r_{\text{ad},3\text{sp}} = 0,03 \text{ nm}$ selten sind.

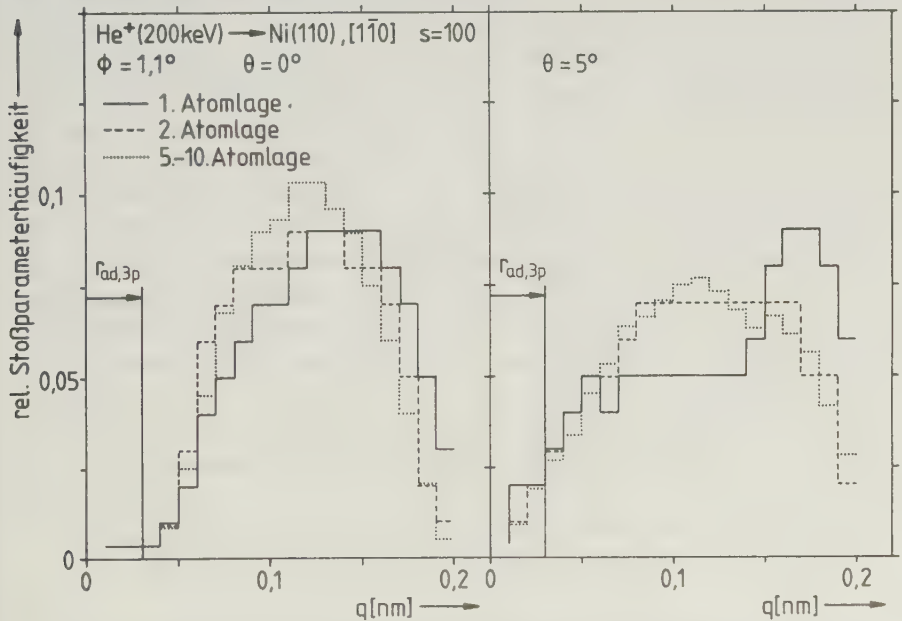


Abb.5.10 : Stoßparameterverteilungen in verschiedenen Atomlagen bei Einschuß unter Gitterführungsbedingungen ($\theta=0^\circ$) und bei Randomeinschuß ($\theta=5^\circ$). Die Verteilungen sind so normiert, daß die Fläche unter der Verteilung jeweils = 1 ist.

5.4. Zum Austritt produzierter Sekundärelektronen

Der Austritt der produzierten Sekundärelektronen wird nach (5.10) approximativ durch einen Exponentialfaktor $\exp(-|z|/L)$ beschrieben. Das gilt in einer klassischen Betrachtungsweise der Elektronen exakt, wenn ein austrittsfähiges Elektron schon bei einer einzigen Wechselwirkung, die nach einer mittleren freien Weglänge L_{in} erfolgt, seine Austrittsfähigkeit verliert, also energetisch unter das Vakuumniveau absinkt. Dies gilt auch dann noch, wenn man von einer von der Elektronenenergie E_0 abhängigen freien Weglänge $L_{in}(E_0)$ ausgeht und eine Energie- und Winkelverteilung der produzierten Elektronen ansetzt. Dann ist die mittlere Austrittswahrscheinlichkeit $p_{ex}(z)$ eines in der Tiefe z unter der Kristalloberfläche erzeugten Elektrons :

$$(5.25) \quad p_{ex}(z) = \iint w(E_0, \theta') \cdot \exp\left(-\frac{|z|}{L_{in}(E_0) \cos \theta'}\right) dE_0 d\theta' ,$$

θ' : Winkel zur Oberflächennormalen, unter dem ein Elektron in der Tiefe z startet;

$|z|/\cos \theta'$ ist die Wegstrecke zur Oberfläche;

$w(E_0, \theta')$: beinhaltet die E_0 - und θ' -Verteilung der produzierten Elektronen, sowie eine E_0 -abhängige Wahrscheinlichkeit der Überwindung der Oberflächenbarriere [99] .

Nach dem verallgemeinerten Mittelwertsatz der Integralrechnung [100] gibt es ein E_0^* und ein θ^* mit :

$$\begin{aligned} (5.26) \quad p_{ex}(z) &= \int \exp\left(-\frac{|z|}{L_{in}(E_0^*) \cos \theta'}\right) \left(\int w(E_0, \theta') dE_0 \right) d\theta' = \\ &= \exp\left(-\frac{|z|}{L_{in}(E_0^*) \cos \theta^*}\right) \iint w(E_0, \theta') dE_0 d\theta' = \\ &= \exp(-|z|/L) , \end{aligned}$$

mit einer effektiven mittleren freien Weglänge L .

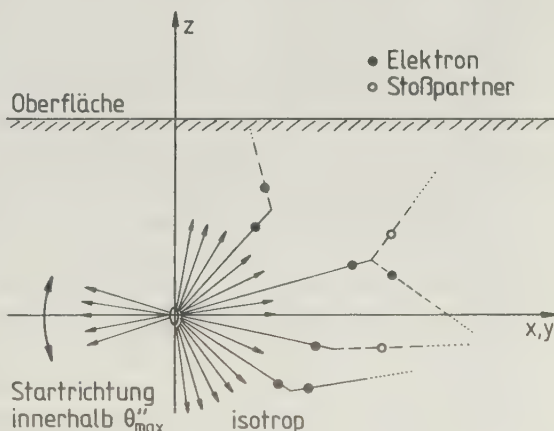
Es bleibt zu fragen, inwieweit ein Exponentialfaktor auch dann verwendbar ist, wenn ein Elektron, wie beim Sekundärelektronenaustritt, nach einem Stoß mit verminderter Energie (aber immer

noch über Vakuumniveau) oder mit veränderter Richtung (eventuell nur elastisch gestreut) weiterfliegen kann oder wenn es noch zusätzliche austrittsfähige Elektronen anregt.

Dazu wurde ein einfaches Monte-Carlo-Modell untersucht. Zugrundegelegt ist ein halbklassisches freies Elektronengas mit vorzugebender Fermienergie E_F . Ebenfalls vorzugeben sind ein Vakuumniveau $E_V > E_F$, eine inelastische und eine elastische freie Weglänge L_{in} bzw. L_{el} . N_0 Elektronen der Energie E_0 starten im Ursprung des Koordinatensystems (x,y,z) wahlweise isotrop oder gleichmäßig verteilt in einem eingeschränkten Emissionswinkelbereich $|\theta''| < \theta''_{max}$, wobei θ'' den Winkel zwischen dem Startimpuls und der xy -Ebene bezeichnet (Abb.5.11). Nach Zurücklegung einer Strecke Δ mit $\Delta \ll L_{in}$ und $\Delta \ll L_{el}$ findet mit einer Wahrscheinlichkeit $p_{in} = \Delta/L_{in}$ ein inelastischer, mit einer Wahrscheinlichkeit $p_{el} = \Delta/L_{el}$ ein elastischer Stoß statt[#]. Dazu wird jeweils eine in $[0,1]$ gleichverteilte Zufallszahl r gezogen und geprüft, ob $r < p_{in}$ bzw. $r < p_{el}$. Im Programm ist Δ als Längeneinheit verwendet.

Abb.5.11 : Stoßprozesse in der halbklassischen Modellrechnung :

- inelastisch, Elektron bleibt austrittsfähig
- ein zusätzliches austrittsfähiges Elektron entsteht
- nur Stoßpartner ist austrittsfähig
- elastisch.



[#]ist $P(z) = \exp(-z/L)$ die Wahrscheinlichkeit eine Strecke z ohne Stoß zu überstehen, p die Wahrscheinlichkeit in $\Delta \ll L$ zu stoßen, $1-p$ die, nicht zu stoßen, folgt :

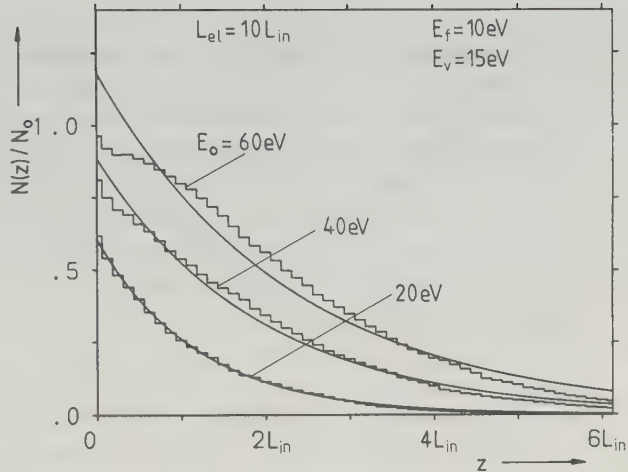
$$\left. \begin{array}{l} \text{einerseits : } P(z+\Delta) = P(z) - (\Delta/L) \cdot P(z) \\ \text{andererseits : } P(z+\Delta) = P(z) \cdot (1-p) \end{array} \right\} p = \Delta/L .$$

Erfolgt eine elastische Streuung, ändert sich die Impulsrichtung des Elektrons in zufälliger Weise. Bei einem unelastischen Stoß wird als Stoßpartner ein Elektron mit Energie E_F und zufälliger Impulsrichtung gewählt. Seien E' und E'' die Energien des Elektrons und seines Streupartners nach dem Stoß, wie sie sich aus Energie- und Impulserhaltung bei einem zufällig gezogenen Stoßparameter ergeben [47]. Ist $E' \leq E_F$ oder $E'' \leq E_F$, wiederholt man die Berechnung mit einem anderen Stoßparameter, da die Zustände unter E_F als besetzt angenommen sind. Ist $E' \leq E_V$, $E'' > E_V$ oder $E'' \leq E_V$, $E' > E_V$, wird das austrittsfähige Elektron weiterverfolgt. Ist $E'' > E_V$ und $E' > E_V$, werden beide Teilchen weiterverfolgt. Ist schließlich $E' \leq E_V$ und $E'' \leq E_V$, wird abgebrochen.

Die Abbildung 5.12 zeigt das Ergebnis einer derartigen Modellrechnung. Aufgetragen ist als Treppenfunktion die Zahl $N(z)$ der Elektronen, die eine angenommene Oberfläche in der Höhe z über dem Startpunkt erreichen, bezogen auf die Zahl N_0 der gestarteten Teilchen (meistens $N_0 = 2000$). Die glatten Kurven stellen Näherungen der Form $\exp(-|z|/L)$ mit angepaßtem L dar. Weitere Beispiele für verschiedene Parameterwerte und -kombinationen finden sich im Anhang VI. Darunter auch solche, bei denen nicht die Verteilung $N(z)/N_0$ ermittelt wurde, sondern die Zahl $N^*(z)/N_0$ derjenigen Elektronen, die eine angenommene Oberfläche bei z auch unter Berücksichtigung der Tatsache überschreiten könnten, daß dazu der Impuls parallel zur z -Achse, nicht nur der Gesamtimpuls, groß genug sein muß. Elektronen, die das nicht erfüllen und die Totalreflexion erfahren, werden hierbei nicht weiterverfolgt. Das Überwinden der Oberflächenbarriere bei z in einem zweiten oder höheren Anlauf wird so vernachlässigt. Da zusätzlich neue Elektronen angeregt werden können, ist $N(z)/N_0$ bzw. $N^*(z)/N_0$ gegebenenfalls auch >1 .

Es zeigt sich, daß der Exponentialfaktor eine gute Näherung der Transportfunktion η (aus (5.5)) bleibt, zumindest bis zu Energien $E_0 = 40-50$ eV ($E_0 - E_F \approx 30$ eV), obwohl auch hier in der Austrittskaskade bis zum Abbruch durchschnittlich schon 1-3 zusätzliche Elektronen pro gestartetem Elektron entstehen können und jeweils 6-15 inelastische Stöße stattfinden (Anhang VI).

Abb.5.12 : Beispiel einer Modellrechnung zum Austritt von Elektronen unter der Annahme $L_{el} \gg L_{in}$. E_F , E_V entsprechen Verhältnissen in Metallen.



Erst bei noch höheren Startenergien $E_0 \geq 60-80 \text{ eV}$ beginnen stärkere Abweichungen (3-6 neuerzeugte Elektronen, 14-25 inelastische Stöße). Gilt das Exponentialgesetz für alle in Frage kommenden E_0 mit unterschiedlicher freier Weglänge $L(E_0)$, so gilt es wie bei (5.26), mit einem nochmals gemittelten L , auch bei Vorliegen eines E_0 -Spektrums.

Die Energie ausgetretener Sekundärelektronen liegt (bei Ioneneneinschuß senkrecht zur Oberfläche) experimentell fast ausschließlich zwischen 0-15 eV über Vakuumniveau, mit einem Maximum bei $<5 \text{ eV}$ [26]. Für eine Austrittsarbeit von $\phi = 4-5 \text{ eV}$ entspricht dem eine Energie von 4-20 eV über dem Fermi-niveau. Die mittlere Startenergie der produzierten austrittsfähigen Elektronen vor Durchlaufen der Austrittskaskade ist jedoch höher: 25-35 eV über E_F . Dieser Wert wird für ϵ_{ex} (aus (5.6)) in den empirischen SEE-Theorien angegeben [71]. Er ergibt sich im interessierenden Projektilenergiebereich auch für ein freies Elektronengas der Dichte $\chi^2 = 0,3-0,4$, wie sie in Metallen vorliegt (Abbn.5.3 und 5.5). Somit scheint die Verwendung des Exponentialterms noch gerechtfertigt.

Obzwar L eine vielfach gemittelte Größe mit eher formaler Bedeutung ist, die man in den Rechnungen dem Experiment anzupassen hat, bietet die inelastische freie Weglänge von Elektronen in Metallen eine ungefähre Orientierung.

Diese beträgt für Elektronen mit Energien von 10-40 eV über der Fermienergie 0,5-2 nm [06,97].

Abschließend ist zu erwähnen, daß bei einem Einkristall auch Beugungseffekte der austretenden niederenergetischen Elektronen am periodischen Gitter feststellbar sind [101,102,103]. Dazu ist aber eine energie- und winkelaufgelöste Spektroskopie der ausgetretenen Sekundärelektronen erforderlich. Für eine energie- und winkelintegrierte Messung, wie im vorliegenden Fall, ist das ohne Belang.

5.5 Beschreibung von Sekundärelektronenproduktion und elektronischem Energieverlust in der Computersimulation

Die Berechnung relativer SEE-Ausbeuten im Simulationsprogramm geschieht gemäß (5.11). Für die Anzahl produzierter austrittsfähiger Elektronen pro Stoß $(\Delta N_e)_i$ wird im Kristallvolumen von einem ortsabhängigen Modellansatz ausgegangen :

$$(5.27) \quad dN_e(r)/ds = (dN_e/ds)_{\text{ran}} \cdot [\hat{a} + (1-\hat{a}) \cdot c_1 \cdot \exp(-\hat{b}r/a_{\text{tf}})] \quad ,$$

$$(5.28) \quad (dN_e/ds)_{\text{ran}} = \zeta(E) \cdot (-dE/ds)_e \approx \zeta_0 \cdot (-dE/ds)_e \quad ,$$

$(dN_e/ds)_{\text{ran}}$: der ortsunabhängige, über eine Randomtrajektorie im Volumen gemittelte Wert der Sekundärelektronenproduktion pro Weglänge; er enthält die Abhängigkeit der Elektronenproduktion von der Projektilenergie und wird (etwa) proportional zum elektronischen Random-Energieverlust des Projektils angesetzt : $\zeta(E) \approx \zeta_0 = \text{const.}$ Dies ist hier trotz diesbezüglicher Einwände aus den Rechnungen zum freien Elektronengas (Abschnitt 5.2) erlaubt : Denn erstens ändert sich die Projektilenergie im oberflächennahen Bereich, der für die SEE verantwortlich ist, nur wenig, so daß die E-Abhängigkeit von (dN_e/ds) unkritisch ist und nur grob berücksichtigt zu werden braucht. Zum zweiten, hat man bei Ni kein freies Elektronengas vorliegen und kann sich an der experi-

mentell gefundenen Proportionalität zwischen dN_e/ds und $(-dE/ds)_e$ orientieren [24,70];

r : Abstand zum jeweils nächstliegenden Ni-Kern; Bezug auf den Thomas-Fermi-Radius a_{tf} , da dieser die im Programm verwendete Längeneinheit ist;

$\hat{a}$: Parameter, der die Beschreibung eines ortsunabhängigen Anteils der Sekundärelektronenproduktion erlaubt, $0 \leq \hat{a} \leq 1$;

$\hat{b}$: Parameter, der die Beschreibung eines ortsabhängigen (bzw. stoßparameterabhängigen, vgl.(5.32)) Anteils der Sekundärelektronenproduktion erlaubt. Die exponentielle Form der r -Abhängigkeit wird nahegelegt durch die Valenzelektronendichteverteilung für $0,02 \text{ nm} < r < 0,08 \text{ nm}$ (Abbn.5.8 und 5.9) und durch ähnliche Ansätze [48,76] zur stoßparameterabhängigen Beschreibung des elektronischen Energieverlusts;

c_1 : Normierungskonstante, so zu bestimmen, daß sich bei Mittelung des ortsabhängigen $(dN_e(r)/ds)$ über eine Wigner-Seitz-Zelle (WS) mit Volumen V_{ws} gerade $(dN_e/ds)_{ran}$ ergibt :

$$(5.29) \quad V_{ws}^{-1} \int (dN_e(r)/ds) dV = (dN_e/ds)_{ran} ,$$

$$(5.30) \quad c_1^{-1} = V_{ws}^{-1} \int \exp(-\hat{b}r/a_{tf}) dV ,$$

berechnete Werte im Anhang II.

An der Kristalloberfläche wird der ortsabhängige Anteil unverändert weiterverwendet, der ortsunabhängige Anteil endet im Abstand c über der Oberfläche. Dieser Elektronendichteausläufer wird mit $c = 0,1 \text{ nm}$ abgeschätzt, kann aber probehalber auch variiert werden (Abbn.6.15 und 7.8). Selbstverständlich ist nicht zu erwarten, daß ein derart einfacher Modellansatz den komplexen Einzelheiten und den quantenmechanischen Anforderungen an die Beschreibung der Sekundärelektronenproduktion im Sinne einer modernen Elektronentheorie gerecht wird. Ebenso fehlen Modifikationen bei der Behandlung der Oberfläche. Umgekehrt läßt sich aber auch durch ein Experiment, das, wie die Gitterführung, stets nur die Summe vieler einzelner Elektronenanregun-

gen liefert, kein Aufschluß über die Details eines Einzelprozesses gewinnen. Ein genauerer Ansatz als (5.27) wäre mithin nur dann gerechtfertigt, wenn er als experimentell und theoretisch gesichert gelten kann und keine Anpassung und keine Erprobung verschiedener Modellvorstellungen mehr nötig ist. Dies ist für die Ioneninduzierte SEE jedoch nicht der Fall. Daher wird der einfache, aber durch $\hat{a}$ und $\hat{b}$ flexible Ausdruck (5.27) vorgezogen. Schließlich ist es auch deshalb wünschenswert, eine möglichst einfache Beschreibung der Sekundärelektronenproduktion zu finden, die ausreicht, die experimentellen Ergebnisse angemessen wiederzugeben, da das primäre Interesse nicht den Anregungsmechanismen selbst, sondern der Abhängigkeit der SEE-Ausbeute von der Oberflächenstruktur und den Ionenstreuungseigenschaften gilt.

Zunächst muß nun der ortsabhängige Ansatz (5.27) in eine stoßparameterabhängige Form gebracht werden, um im Programm anwendbar zu sein. Geht man davon aus, daß eine Teilchentrajektorie annähernd parallel zur x-Achse (Einheitsvektor $\mathbf{e}_x^0$) verläuft und eine Streuebene S_i bei $\mathbf{x}_i$ schneidet (Abb.4.6), erhält man für die Zahl erzeugter Elektronen beim Stoß mit dem Atom A_i in Abhängigkeit vom Stoßparameter $q = |\mathbf{x}_i - \mathbf{r}_i|$:

$$(5.31) \quad (\Delta N_e(q))_i = \left\langle \int_{-D/2}^{D/2} \frac{dN_e(r=|\mathbf{x}_i + \xi \mathbf{e}_x^0 - \mathbf{r}_\xi|)}{ds} d\xi \right\rangle .$$

$\mathbf{r}_\xi$ bezeichnet den Ortsvektor des dem Trajektorienpunkt $\mathbf{x}_i + \xi \mathbf{e}_x^0$ nächstgelegenen Targetatoms, das nicht notwendig A_i sein muß, da die Wigner-Seitz-Zellen und die Streuebeneinteilung nicht zusammenfallen. Dadurch können sich auch für verschiedene $\mathbf{x}_i$, bei gleichem q , unterschiedliche Integralwerte in (5.31) ergeben, über die dann noch zu mitteln ist, will man einen nur stoßparameterabhängigen Ausdruck. Diese Mittelung (in (5.31) durch die spitzen Klammern gekennzeichnet) ist sinnvoll, da die Schwankungen klein sind (Abb.5.13). Dennoch bleibt (5.31) für die Rechnung unhandlich.

Einen einfacheren Ansatz stellt, in Analogie zur stoßparameterabhängigen Behandlung des elektronischen Energieverlusts [48,76], (5.32) dar :

$$(5.32) \quad (\Delta N_e(q))_i = \xi_0 \cdot (-dE/ds)_e \cdot D \cdot [a + (1-a) \cdot c_2 \cdot \exp(-bq/a_{TF})].$$

Hierbei wird die Form des ortsabhängigen (5.27) übernommen. Die Normierung erfolgt jetzt über ein in Abbildung 4.6 gestrichelt begrenztes Gebiet G (Fläche $|G|=AY \cdot AZ$):

$$(5.33) \quad |G|^{-1} \int (\Delta N_e(q))_i dydz = (dN_e/ds)_{\text{ran}} \cdot D \approx \xi_0 \cdot (-dE/ds)_e \cdot D,$$

$$(5.34) \quad c_2^{-1} = |G|^{-1} \int \exp(-b\sqrt{y^2+z^2}/a_{TF}) dydz \quad (\text{Anhang III,V}).$$

In Abbildung 5.13 sind (5.31) und (5.32), jeweils dividiert durch $\xi_0 \cdot (-dE/ds)_e$ für $\hat{a} = a = 0$ und zwei verschiedene $\hat{b}$ - bzw. b -Werte dargestellt.

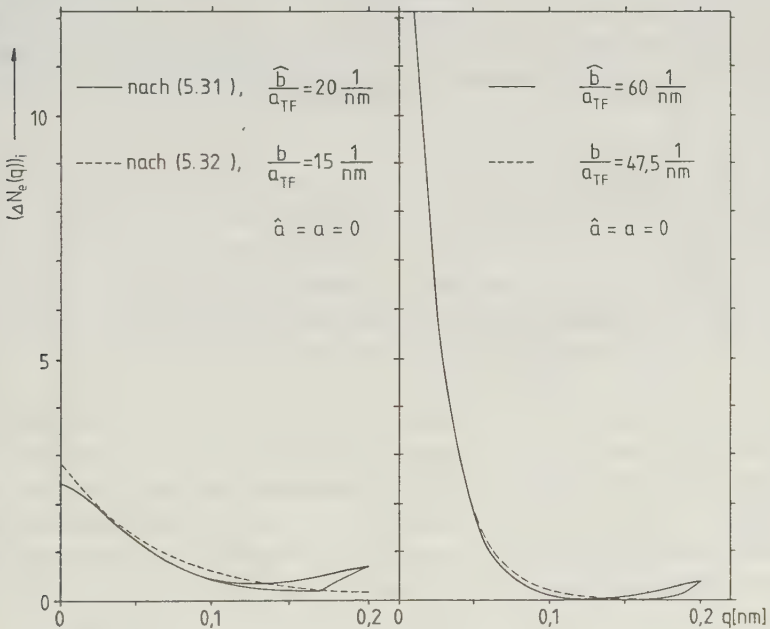


Abb.5.13 : Stoßparameterabhängigkeit nach (5.31) und (5.32). Die Aufspaltung der durchgezogenen Linie von (5.31) zeigt den Bereich, in dem die Werte bei gleichem q , aber verschiedenem x_i schwanken.

Man sieht, daß (5.31) und (5.32) praktisch gleichwertige Beschreibungen abgeben, wobei allerdings eine Abweichung zwischen $\hat{b}$ und b zu beachten ist (Anhang IV). Durch Vergleich der stoßparameterunabhängigen Anteile in (5.31) und (5.32) erkennt man demgegenüber, daß die Parameter $\hat{a}$ und a jeweils übereinstimmen.

Es lassen sich zwei verschiedene Modellvorstellungen gegenüberstellen :

1. Lokales Dichtemodell nach [78,79,90,104] : Das $(dN_e(r)/ds)$ wird als $(dN_e(n_e(r))/ds)$, also als Funktion der lokalen Valenzelektronendichte n_e verstanden und es wird eine Dichteabhängigkeit der Sekundärelektronenproduktion wie beim freien Elektrogas (Abschnitt 5.2) angesetzt. Für $\text{He}^+(200\text{keV})$ beträgt $v/v_0 = 1,4$, so daß nach Abbildung 5.7 für die vorliegenden Valenzelektronendichten ($n_e \gtrsim 1$ Elektron/Nickel-Atom = 91 nm^{-3} , Abb.5.9) kaum eine Dichteabhängigkeit besteht, also $\hat{a} = a \approx 1$ und $\hat{b} = b \approx 0$.

2. Elektronendichte proportionalität : $(dN_e(r)/ds)$ wird der lokalen Valenzelektronendichte proportional gesetzt :

$$(dN_e(r)/ds) \sim n_e(r).$$

Gemäß (5.23) erwartet man damit zunächst ein $\hat{b}/a_{tf} \approx 64 \text{ nm}^{-1}$.

Dann kann $\hat{a}$ abgeschätzt werden, etwa aus dem Verhältnis

$$dN_e(r=0,077 \text{ nm})/ds : dN_e(r=0,042 \text{ nm})/ds =$$

$$= n_e(r=0,077 \text{ nm}) : n_e(r=0,042 \text{ nm}) = 128 : 1024 ,$$

mit dN_e/ds aus (5.27) mit $\hat{b}/a_{tf} = 64,2 \text{ nm}^{-1}$ und n_e aus Abbildung 5.8. Mit der Normierungskonstanten $c_1(\hat{b}/a_{tf} = 65 \text{ nm}^{-1}) = 121$ (Anhang II) ergibt sich $\hat{a} \approx 0,15$. Dem $\hat{b}$ -Wert entspricht in stoßparameterabhängiger Darstellung (5.32) ein $b/a_{tf} = 50\text{--}55 \text{ nm}^{-1}$ (Anhang IV) und speziell für He ($a_{tf} = 0,0142 \text{ nm}$) $b = 0,7\text{--}0,8$. Dem $\hat{a}$ -Wert entspricht ein gleiches $a \approx 0,15$.

Es ist darauf hinzuweisen, daß die Beschreibung der Ionenstreuung und die Beschreibung der SEE in der Computersimulation nicht gegenseitig abgestimmt ist. Denn eine Variation des Modellwirkungsquerschnitts für die Elektronenanregung (d.h. verschiedene $\hat{a}, a$ bzw. $\hat{b}, b$) bedeutet jeweils eine veränderte

Reaktion des Elektronensystems auf das einfallende Ion. Dies müßte sich genaugenommen auch in einem veränderten Wechselwirkungspotential (4.1) und in einer veränderten Streuformel (4.20) ausdrücken. Nun ist aber (4.1) oder (4.20) ohnehin nicht Ergebnis einer quantenmechanisch umfassenden Theorie der Wechselwirkung eines schnellen Ions mit einem Kristall, unter Berücksichtigung seiner genauen elektronischen Struktur. Elektronische Abschirmeffekte kommen nur vereinfacht und pauschal im Thomas-Fermi-Radius a_{tf} zum Ausdruck. Diese Näherung genügt jedoch für eine gute Wiedergabe des Streuverhaltens und der Ionenflußdichteverteilung [11,39]. So wird auch die Entkopplung der angesetzten Stoßparameterabhängigkeit der Elektronenproduktion und der Streuformel legitim.

Im Programm wird der elektronische Energieverlust eines Projektils ebenfalls stoßparameterabhängig durch (5.32) mit $\xi_0 = 1$ und mit tabellierten empirischen Werten für $(-dE/ds)_e$ nach Ziegler [49] bestimmt, wie sie auch zur Auswertung für $(\Delta N_e)_i$ verwendet werden. Der elektronische Energieverlust wirkt sich im vorliegenden Energiebereich nur schwach auf Streuverhalten und Ionenfluß aus (Abschnitt 6.1.1, Abb.6.4). Daher ist der Gebrauch eines anderen Ansatzes hierfür nicht aussagekräftig, auch wenn die Proportionalität von Energieverlust und Elektronenproduktion nach Abschnitt 5.2 keineswegs selbstverständlich ist.

Schließlich wird der Beitrag eines Projektils zur SEE-Ausbeute auf dem Trajektorienabschnitt abgeschätzt, auf dem es nach Überschreiten eines Abbruchkriteriums nicht mehr verfolgt wird. Man extrapoliert diesen restlichen Bahnabschnitt gradlinig aus dem Abbruchimpuls und der mittleren empirischen Randomreichweite eines Projektils der Abbruchenergie [49]. Es ergeben sich Korrekturen im Promille-Bereich.

6. Sekundärelektronenemission an der sauberen Ni(110)-Oberfläche

6.1. $\text{He}^+(200\text{keV}) \rightarrow \text{Ni}(110), [1\bar{1}0]$

Die Abbildung 6.1a zeigt den gemessenen Targetstromverlauf bei Einschub von 200 keV He^+ -Ionen auf eine saubere Ni(110)-Oberfläche entlang der $[1\bar{1}0]$ -Richtung bei einem Einschubwinkel von $\phi = 1^\circ \pm 0,15^\circ$. Darunter ist der Strom der reflektierten Ionen, ebenfalls für $\phi = 1^\circ \pm 0,15^\circ$ und in Abhängigkeit vom Winkel θ zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung dargestellt. Beide Kurven sind auf die jeweiligen Randomwerte (bei $\theta = 5^\circ$) normiert. Der absolute Randomwert der SEE-Ausbeute beträgt $\gamma = I_t(\theta=5^\circ)/I_0 = 61 \pm 3$ Elektronen/Ion, wogegen die Rate spiegelreflektierter Ionen bei $(13 \pm 2)\%$ des einfallenden Strahlstroms I_0 liegt. Im Vergleich dazu findet man bei senkrechtem Ioneneinschub nur SEE-Koeffizienten γ von 1-3 Elektronen/Ion [24]. Bei Einschub parallel zu $[1\bar{1}0], \theta = 0^\circ$, steigt die Elektronenausbeute um fast das Doppelte an.

Üblicherweise läßt sich die volle Halbwertsbreite eines Gitterführungsprofils mit dem doppelten kritischen Winkel $2\theta_c = 2(\psi_c^2 - \phi^2)^{1/2}$ vergleichen. θ_c beträgt im vorliegenden Fall $\theta_c = 3,1^\circ$ (aus (4.3)). Man sieht jedoch, daß die volle Halbwertsbreite des SEE-Profils mit $3,5^\circ$ fast um die Hälfte geringer ist als $2\theta_c = 6,2^\circ$. Dagegen beginnt der Anstieg der SEE-Ausbeute gerade bei $\theta = \theta_{ap} = 3,64^\circ$ [21], dem Winkel, wo die planare Oberflächengitterführung aufhört und axiale Führung einsetzt (Abschnitt 4.1.2). Planare Oberflächengitterführung ist möglich, da $\phi = 1^\circ < \phi_{sp} = 1,16^\circ$ (aus (4.4)). Damit bestätigt sich das in Abschnitt 4.1.3 allgemein Gesagte, daß nämlich für Reaktionsausbeuten, die bei Oberflächengitterführung ein Maximum gegenüber dem Randomwert aufweisen, die Reflexion der Teilchen von großer Wichtigkeit ist.

Die Zahl der reflektierten Ionen sinkt mit Einsetzen der Gitterführung, steigt aber für $|\theta| < 2^\circ$ zu einem (Fokussierungs-)Maximum (Abschnitt 4.1.2) an, wobei das 1,5-fache des Randomwerts (20% des einfallenden Strahls) erreicht wird.

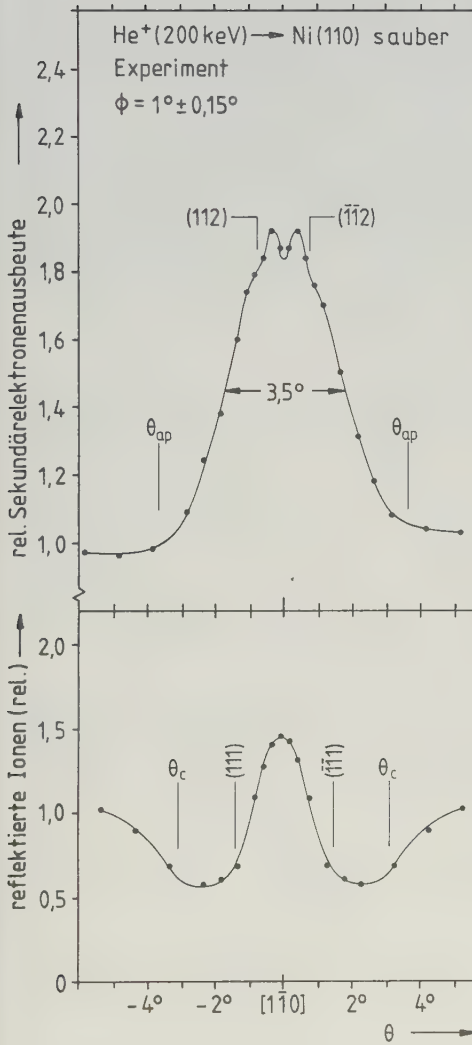


Abb. 6.1a

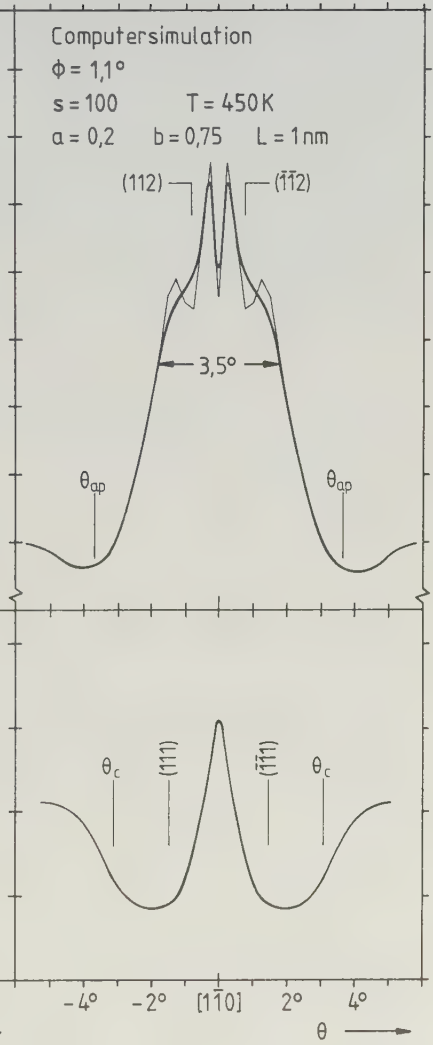


Abb. 6.1b

Es sind auch einige Winkel $\theta_{(uvw)}$ nach (4.5) eingetragen.

In den Abbildungen 6.1a,b ist auch die planare (111)-bzw. ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)-Richtung eingetragen ($\Theta_{(111)}=1,42^\circ$). Ein besonderer Einfluß dieser Ebenen auf die SEE ist nicht festzustellen.

Mit dem Wiederanstieg der Reflexion für $|\Theta| < 2^\circ$ ist kein komplementärer Rückgang der SEE verbunden, da bei dieser Reflexion bei axialer Gitterführung, im Gegensatz zur Spiegelreflexion bei planarer Oberflächengitterführung, die Teilchen in die Oberfläche eindringen und vor allem länger in den obersten Atomlagen verweilen (Abbn.4.4 und 4.5 : $m_2 > m_1$). Dies wird aus den Ionenflußdichteverteilungen (Abschnitt 6.1.2) deutlich.

Der Rückgang der Reflexionsausbeute beginnt im Gegensatz zum Anstieg der SEE bereits bei $|\Theta| \approx 5^\circ > \Theta_{ap} > \Theta_c$. Dies sieht man bei Gitterführungsexperimenten auch an Ausbeuteprofilen von Größen, die nicht, wie die SEE, stark durch die Reflexion von Teilchen, sondern wesentlich durch die Stoßparameterverteilung bezüglich einer obersten Atomkette bestimmt werden (ioneninduzierte AES [39]). Deren volle Halbwertsbreite ist durch $2\Theta_c$ gegeben, das Einsetzen von Gitterführungseffekten läßt sich folglich schon früher, bei $|\Theta| \approx 1,5 \cdot \Theta_c > \Theta_c$ [22] beobachten.

Die Diskrepanz zwischen dem Winkel Θ_{ap} , bei dem die SEE zunimmt und dem, bei dem die Reflexionsausbeute abfällt, findet man auch beim Vergleich dieser Reflexionsausbeute mit der Gesamtausbeute an gestreuten Ionen (Abb.6.2). Erasmus hat diese Messung am selben Kristall ausgeführt [20]. Es wurde lediglich ein Faraday-Becher mit so großer Eintrittsöffnung verwendet, daß der Großteil aller gestreuten Ionen, nicht nur die reflektierten (Abschnitt 3.3) , aufgefangen werden konnte. Die Verminderung der Gesamtstreuerausbeute setzt wieder erst bei $\Theta = \Theta_{ap}$ ein. Bis herab zu $\Theta = \Theta_{ap}$ dringen also noch keine zusätzlichen Teilchen in die Kristalloberfläche. Deshalb steigt die SEE nicht an. Jedoch findet bereits für $5^\circ > |\Theta| > \Theta_{ap}$ eine Modulation der Stoßparameter bezüglich der obersten Atomketten des Kristalls statt. Dadurch läßt die Spiegelreflexion mit einer Streuverteilung wie in Abbildung 3.6 unten nach und es beginnt eine stärkere Aufstreuung (Abb.3.6b mitte), so daß weniger gestreute Teilchen ins Nachweisintervall $0,5^\circ < \Phi_{aus} < 1,5^\circ$ gelangen.

Abb.6.2 : Vergleich insgesamt gestreuter (aus [20]) und reflektierter Ionen . Verhältnis der Randomwerte nach [12].

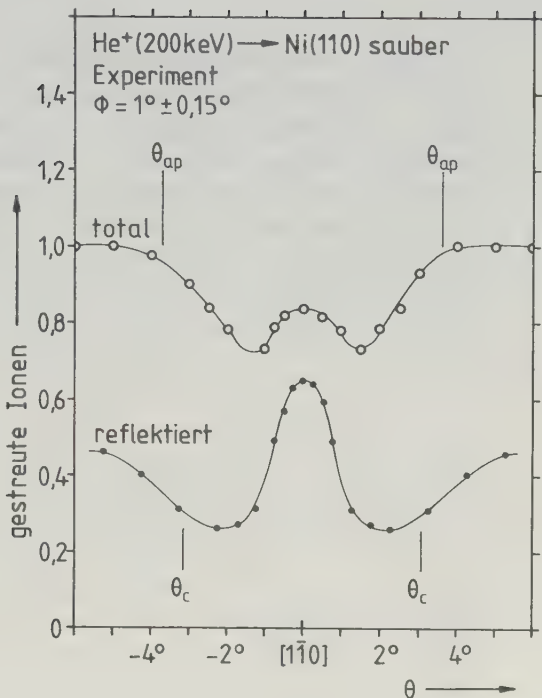
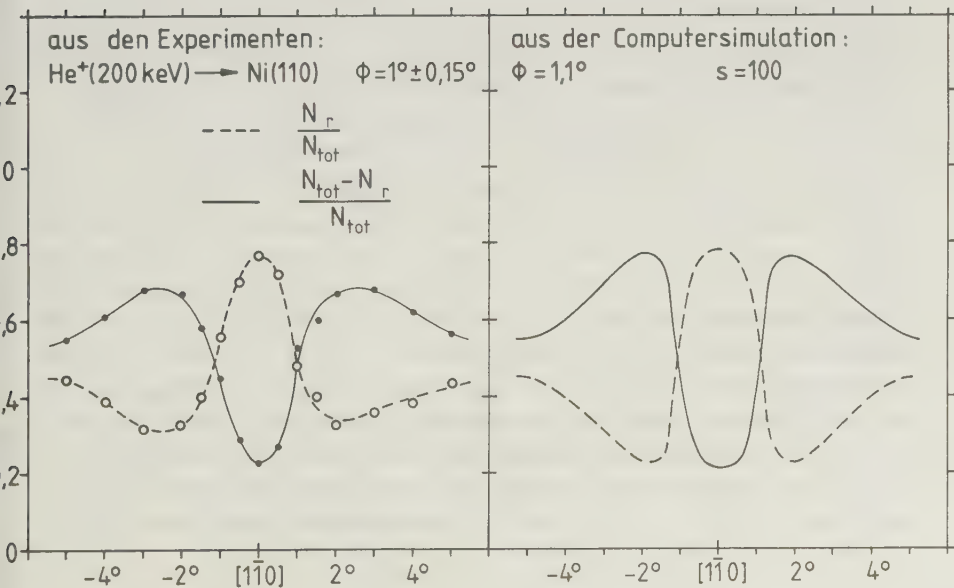


Abb.6.3 (unten) : Verhältnis der insgesamt gestreuten (N_{tot}) und reflektierten Ionen (N_r).



Die beiden Messungen aus Abbildung 6.2 erlauben noch die experimentelle Bestätigung eines von Graser [105] aus Computersimulationen erhaltenen Resultats. In Abbildung 6.3 ist links das Verhältnis N_r/N_{tot} der Zahl reflektierter Ionen N_r zur Zahl der insgesamt gestreuten Ionen N_{tot} sowie der komplementäre Wert $1-(N_r/N_{tot})$ aufgetragen. Neben dem gerade diskutierten Absinken des Reflexionsanteils schon ab $|\theta| = 5^\circ$ erkennt man, daß im Fokussierungsmaximum bei $\theta = 0^\circ$ 80% der insgesamt gestreuten Ionen auch reflektiert werden. Daneben rechts das Simulationsergebnis, vergleichbar dem aus [105].

Der Targetstromverlauf in Abbildung 6.1a weist Strukturierungen auf : ein relatives Minimum bei $\theta = 0^\circ$ und einen Wendepunkt bei $\theta = 0,7^\circ$. Diese Merkmale sind trotz ihrer Kleinheit durchweg reproduzierbar. Es muß darauf hingewiesen werden, daß bei einem He^+ -Strahlstrom von $I_0 = 5-20$ nA der Targetstrom im Bereich von $0,3-2$ μA liegt, so daß die Messung auch derartiger Effekte zuverlässig erfolgen kann. Doch soll geprüft werden, ob für das Minimum bei $\theta = 0^\circ$ mit $\Delta(I_t/I_0) = 3-4$ Elektronen/Ion ($|\theta| < 0,3^\circ$) nicht doch ein Beitrag $\Delta(I_{ion}/I_0)$ aus (3.1) eine Rolle spielt. Dies ist aber nicht der Fall : Der eingeschossene Strahlstrom I_0 ist konstant, der Strom, der vom Kristall in Form gestreuter Ionen abfließt, ändert sich in $|\theta| < 0,3^\circ$ um weniger als 3% (Abb.6.2), also $\Delta(I_{ion}/I_0) = 0,03 \ll \Delta(I_t/I_0)$. Das Minimum bei $\theta = 0^\circ$ ist auf Änderungen der SEE zurückzuführen.

Dies bestätigt auch die Computersimulation (Abb.6.1b), die I_{ion} vernachlässigt und trotzdem die gemessenen Strukturen zeigt. Dabei stellt die fett gezeichnete Kurve eine geglättete Version, die mager gezeichnete Linie die direkte Verbindung der errechneten Punkte dar. Die unmittelbare Rechnung gibt die Strukturen der SEE zu stark wieder. Dies wird durch die verbleibenden Idealisierungen im Programm erklärt (Vernachlässigung von Strahldivergenz und Mosaikverkipnungen, einfacher Modellwirkungsquerschnitt zur Elektronenanregung, nur Oberflächenstufen als Defekte). Befriedigende Übereinstimmung von Experiment und Rechnung, sowohl für die SEE-Ausbeute, als auch für die

Ausbeute reflektierter Ionen, wird im Modell einer aufwärtsgestuften Oberfläche für einen Einschußwinkel von $\Phi = 1,1^\circ$ (innerhalb des experimentellen Fehlers) und für einen Stufenparameter $s = 100$ (Abschnitt 4.2.3) erzielt. Die Parameter zur Beschreibung von Elektronenproduktion und -austritt (Abschnitt 5.5) lauten : $a = 0,2$, $b = 0,75$ und $L = 1$ nm. Die Festlegung dieser Werte wird im nächsten Abschnitt diskutiert. Als Kristalltemperatur im Programm (Abschnitt 4.2.3) ist $T = 450$ K gewählt. Das entspricht der gemessenen Kristalltemperatur 10-20 min nach dem Tempern (Abschnitt 3.2), also der Temperatur, bei der auch die Versuche durchgeführt wurden.

Mit diesen Werten stimmt die volle Halbwertsbreite des SEE-Ausbeutemaximums bei Experiment und Rechnung überein. Die Höhe des Maximums liegt allerdings in der Rechnung um 10% über der Messung. Diese Tendenz zu einem höheren Maximum ist auch bei anderen Rechnungen, z.B. zur [001]-Einschußrichtung (Abb.6.17b), festzustellen. Möglicherweise liefern im Experiment Restkontaminationen und Oberflächendefekte, die im Modell der Aufwärtsstufen nicht erfaßt sind (z.B. steile Flanken, Abschnitt 3.2), einen Θ -unabhängigen positiven Beitrag δI_t zum Targetstrom I_t , der im Programm unberücksichtigt bleibt. Die Höhe des relativen Maximums beträgt dann eigentlich $(I_{t,max} + \delta I_t) / (I_{t,ran} + \delta I_t) = 1 + (I_{t,max} - I_{t,ran}) / (I_{t,ran} + \delta I_t)$ mit $I_{t,max}$ ($I_{t,ran}$) als berechneten Maximalwert (Randomwert) des Targetstroms. Die Vernachlässigung von δI_t führt daher zu einem höheren Maximum der relativen SEE.

Der Wendepunkt in der SEE-Kurve, experimentell bei $\Theta = 0,7^\circ$, erscheint in der Rechnung bei $\Theta = 1^\circ$ und liegt dementsprechend im relativen Kurvenverlauf geringfügig tiefer als im Experiment. Er tritt beim Winkel $\Theta = \Theta_{(112)} = 0,71^\circ$ auf (Abschnitt 4.1.2), doch kann es sich nicht wirklich um einen Effekt planarer Gitterführung handeln, da für die (112)-Ebene $\Psi_{min} = 5,2^\circ$ (aus (4.6)). Näheres ist erst der Ionenflußdichteverteilung (Abschnitt 6.1.2) zu entnehmen.

Die gefundenen Werte der elektronischen Parameter a und b erlauben die Schlußfolgerung, daß bei der SEE an Ni durch leichte Ionen im verwendeten Energiebereich hauptsächlich Valenzelektronen angeregt werden. So passen die Parameter $b = 0,75$ und $a = 0,2$ im Rahmen der im nächsten Abschnitt zu diskutierenden Fehlergrenzen und in Anbetracht der Unterschiede zwischen orts- und stoßparameterabhängiger Anregungswahrscheinlichkeit (Abschnitt 5.5, Anhang IV), gerade zur Dichteverteilung der Valenzelektronen aus Abschnitt 5.3. Die Werte entsprechen nämlich dem Modell 2 aus Abschnitt 5.5, wobei a nur um 0,05 größer ist, als dort abgeschätzt.

Diese Proportionalität der Elektronenproduktion zur Valenzelektronendichte stützt die Vorstellung von Baragiola et al. [61,62,70], wonach die SEE durch leichte schnelle Ionen in Metallen primär durch "direkte Stöße" des Projektils mit den Valenzelektronen zustande kommt. Ein solcher Mechanismus liefert offenbar umso mehr angeregte Elektronen, je mehr Elektronen das Projektil in einem Bahnabschnitt antrifft, also Elektronendichteproportionalität. Der von Parilis und Kishinevski [73,106] vorgeschlagene Mechanismus kann dagegen, zumindest für das vorliegende System, ausgeschlossen werden. Demnach sollte die Mehrzahl der Sekundärelektronen aus einer Ionisation innerer Schalen, gefolgt von Auger-Rekombinationsprozessen resultieren. Diese Vorstellung wird allein durch das Auftreten eines SEE-Maximums widerlegt, da die Ionisation schon des 3p-Orbitals bei Oberflächengitterführung ein Minimum aufweist [107,108].

Die gefundene effektive freie Weglänge $L = 1$ nm entspricht der inelastischen mittleren freien Weglänge von Elektronen mit Energien von 10-30 eV über der Fermienergie [97]. Die Oberflächensensitivität der SEE-Profile ist aber nicht durch diesen Wert von L gegeben, sondern dadurch, daß ihre Form durch die Reflexion von Teilchen an den obersten Atomketten mitbestimmt wird.

6.1.1. Festlegung der Parameter

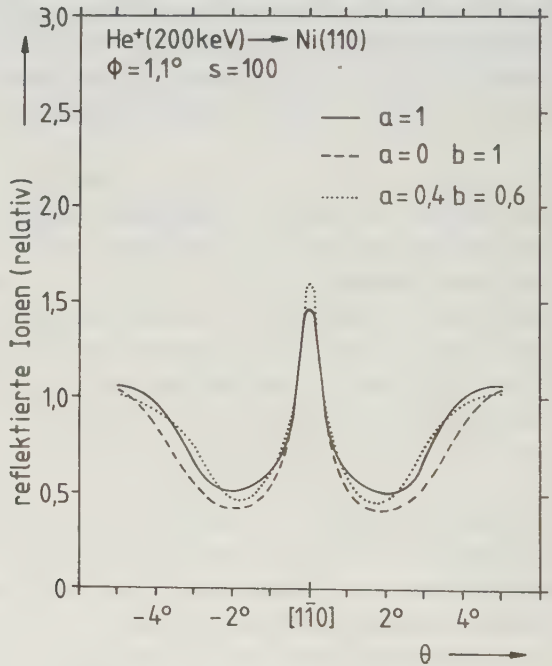
Im Programm sind zunächst die passenden Werte einerseits der Streuparameter (genauer Einschußwinkel Φ und Stufenparameter s), andererseits die der elektronischen Parameter (Stoßparameterabhängigkeit a , b und effektive freie Weglänge L) herauszufinden. Da die Oberflächengitterführung empfindlich vom Einschußwinkel Φ abhängt, ist auch er, innerhalb der experimentellen Fehlergrenzen von $\pm 0,15^\circ$, als variabel anzusehen.

Die beiden Arten von Parametern lassen sich weitgehend getrennt voneinander bestimmen. Zwar wird durch a und b nicht nur die Elektronenanregung, sondern auch der elektronische Energieverlust beschrieben (Abschnitt 5.5), was wiederum die Trajektorienberechnung beeinflusst. Dieser Einfluß ist allerdings gering, insbesondere für die Bahnen reflektierter Teilchen, die in der Kanalmitte geführt werden und die so keine großen Energieverluste erleiden (vgl. Abschnitt 4.2.2 und Abschnitt 5.5, sowie experimentell [18]).

So zeigt Abbildung 6.4 die normierten Ausbeutekurven reflektierter Ionen für verschiedene a und b unter sonst gleichen Bedingungen. Die Werte $a = 0$, $b = 1$ entsprechen der stärkstmöglichen Stoßparameterabhängigkeit, die im Programm vorgesehen ist. Der Wert $a = 1$ entspricht der Stoßparameterunabhängigkeit (b hat in diesem Fall keine Bedeutung). Der Fall $a = 0,4$, $b = 0,6$ zeigt ein Beispiel zwischen beiden Extremen. Es ergeben sich nur leichte Änderungen am Kurvenverlauf. Insgesamt wurden so Reflexionsprofile für 21 verschiedene a - b -Kombinationen errechnet ($\Phi = 1,1^\circ$, $s = 100$). Dabei findet man für die relative Ausbeute reflektierter Ionen bei $\Theta = 0^\circ$ einen Mittelwert von $1,5 \pm 0,1$ und für den absoluten Prozentsatz spiegelreflektierter Ionen im Randomfall ($\Theta = 5^\circ$) einen Wert von $(22 \pm 2)\%$. Ein systematischer Gang der Veränderungen für die verschiedenen a und b ist nicht zu bemerken.

Im Rahmen der so gegebenen Genauigkeit kann jetzt die Festlegung des bestübereinstimmenden Einschubwinkels ϕ und des Stufenparameters s ohne Beachtung der Parameter a , b und L erfolgen. Danach werden die elektronischen Parameter bei nunmehr festem ϕ und s ausgewählt.

Abb.6.4 : Berechnete Ausbeuteprofile der reflektierten Ionen für verschiedene Parameterwerte a, b .



Dazu wurde für $\phi = 1^\circ$ und $\phi = 1,1^\circ$, sowie für s zwischen $s = 50$ und $s = \infty$ (keine Stufen) gerechnet. Die wichtigsten der dabei erhaltenen Profile sind in Abbildung 6.5 dargestellt. In Abbildung 6.6 sind für $\phi = 1,1^\circ$ und verschiedene s die ermittelten Random-Absolutwerte aufgetragen (rechte Skala; links ist auf den Wert für $s = 100$ normiert). Eine feinere Unterteilung von s als angesetzt ist in Anbetracht des Modellcharakters der einfach aufwärtsgestuften Oberfläche nicht sinnvoll.

Abb.6.5 : Berechnete Ausbeuteprofile der reflektierten Ionen für verschiedene Werte von ϕ und s .

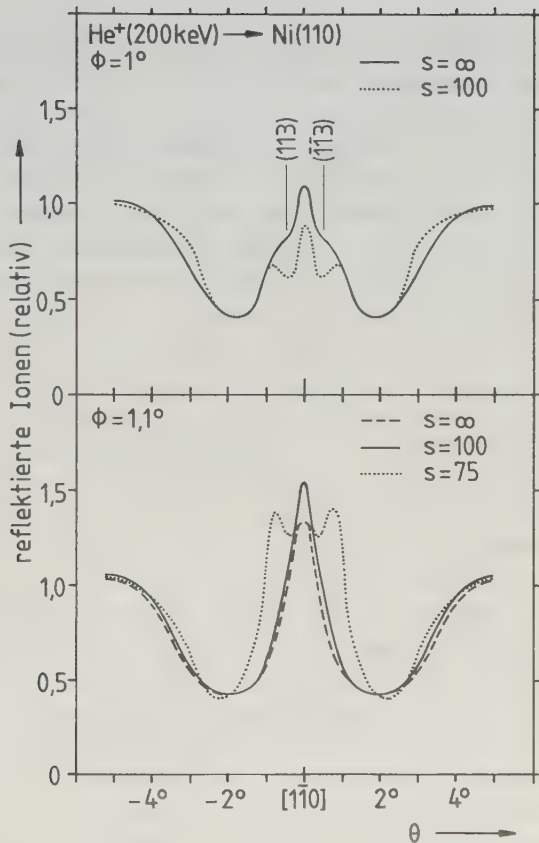
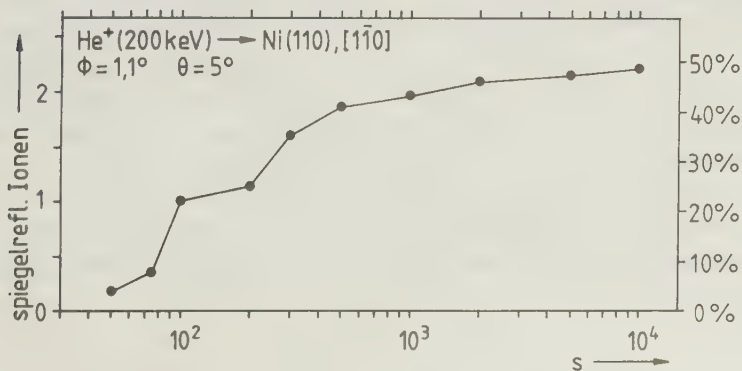


Abb.6.6 : Berechnete absolute Spiegelreflexionsausbeute (rechte Skala) bei planarer Oberflächengitterführung.



Die Rechnungen zu $\Phi = 1^\circ$, $s = \infty, 100$ liefern eine falsche Höhe des Maximums bei $\Theta = 0^\circ$ (< 1 , statt experimentell 1,5), sowie nicht beobachtete Strukturen. Für $\Phi = 1^\circ$, $s = 75,50$ liegt der absolute Prozentsatz spiegelreflektierter Ionen (bei $\Theta = 5^\circ$) mit 3-4% deutlich unter dem Experiment mit $(13 \pm 2)\%$. $\Phi = 1,1^\circ$, $s = 75,50$ erbringt ebenfalls zu niedere Absolutwerte (8%, 4%), ferner bei $s = 75$ nicht beobachtete Strukturen. Für $\Phi = 1,1^\circ$, $s = 100$ erhält man befriedigende Übereinstimmung in der Höhe des Maximums. Es ist schmaler als bei der experimentellen Kurve, was möglicherweise durch das einfache Modell der Aufwärtsstufen bedingt ist [21]. Bei $\Phi = 1,1^\circ$, $s = \infty$ schließlich hat man bei ähnlicher Kurvenform wie bei $s = 100$ ein verringertes Maximum. Zudem weicht der Random-Absolutwert spiegelreflektierter Ionen bei $s = \infty$ mit fast 50% wesentlich stärker vom gemessenen Ergebnis ab, als die 20% bei $s = 100$. Ein etwas höherer absoluter Prozentsatz in der Rechnung ist, verglichen mit dem Experiment, sogar zu erwarten: Neben den im Programm berücksichtigten Stufen gibt es auf der Oberfläche noch die groben Störungen, durch die ein Teil der eingeschossenen Ionen verloren geht (Abschnitt 3.2). Das heißt, daß nur ein Teil $\alpha \cdot I_0$ ($0 < \alpha < 1$) des einfallenden Strahls I_0 ein der Simulation entsprechendes Schicksal erleidet. Die Normierung des Becherstroms I_C (Abschnitt 3.3) hat damit auf $\alpha \cdot I_0$ zu erfolgen, um mit den berechneten Reflexionsausbeuten der Simulationen vergleichbar zu sein. Für $0 < \alpha < 1$ ist $I_C/I_0 < I_C/(\alpha I_0)$.

Der Wert $s \approx 100$ wird noch durch Folgendes nahegelegt: Die Neigung der geometrischen Oberfläche zur kristallographischen (110)-Ebene, die durch die Stufen bedingt ist, beträgt $\delta = \text{Stufenhöhe/mittlerer Stufenabstand}$ (Stufenhöhe $\ll$ Stufenabstand). Für Ni(110) und in der $[1\bar{1}0]$ -Gitterrichtung ist $\delta = (d/(2\sqrt{2}))/((sd)/\sqrt{2}) = 1/(2s)$ ($d=0,3524$ nm, Gitterkonstante, vgl. Abb.4.2). Von der Kristallpräparation kennt man eine mittlere Neigung durch die Oberflächenwelligkeit (Abschnitt 3.2) $\delta = 0,3^\circ$, also $s = 1/(2\delta) \approx 95$.

Im weiteren wird das Modell mit der geringsten Diskrepanz zwischen Rechnung und Experiment zugrunde gelegt, also $\Phi = 1,1^\circ$ und $s = 100$.

Zur Festlegung der elektronischen Parameter wurden SEE-Ausbeutekurve für alle Kombinationen von

$a = 0,0; 0,2; 0,4; 0,6; 1,0$

$b = 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 1,0$

$L = 0,5 \text{ nm}; 1 \text{ nm}; 2 \text{ nm}$ simuliert.

Ihr jeweils normiertes Maximum $I_{t,max}/I_{t,ran}$, sowie ihre volle Halbwertsbreite ist in den Abbildungen 6.7a-c zusammen mit den entsprechenden experimentellen Werten zu sehen.

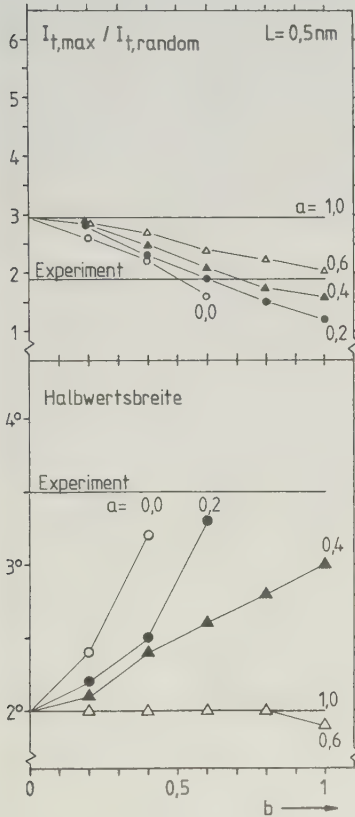


Abb. 6.7a

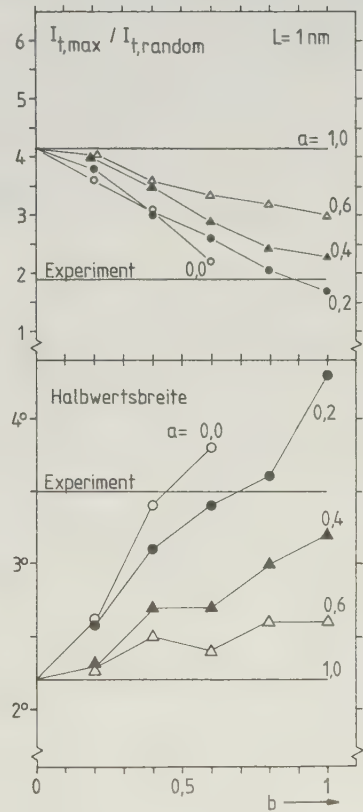
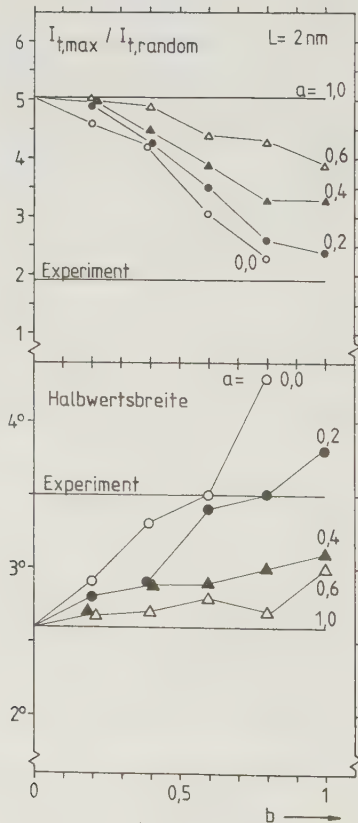


Abb. 6.7b

Abbn. 6.7a-c : $I_{t,max}/I_{t,ran}$ und volle Halbwertsbreiten für verschiedene Werte von a, b und L . $\Phi = 1,1^\circ$, $s = 100$, $T = 450 \text{ K}$

Dabei ist generell die Tendenz auszumachen, daß mit kleinerem a oder größerem b das Maximum ab- und die Halbwertsbreite zunimmt. Die am besten geführten Teilchen produzieren dann in der Kanalmitte immer weniger Sekundärelektronen, im Vergleich zu Teilchen, die auch die Kanalränder erreichen. Für Höhe, Halbwertsbreite und genaue Kurvenform der SEE ist also die inhomogene Elektronendichteverteilung und die Stoßparameterabhängigkeit der Elektronenproduktion neben dem Ionenfluß gleichermaßen von Bedeutung.

Abb. 6.7c



Hingegen setzt der Anstieg der SEE bei über 80% aller gerechneten Fälle beim gleichen Winkel $\Theta = \Theta_{ap} \approx 3,5^\circ$ ein, und zwar auch dann, wenn die Halbwertsbreiten der jeweiligen Kurven stark unterschiedlich sind. So bestätigt sich, daß für $\Phi < \Phi_{sp}$ die SEE bei axialer Oberflächengitterführung deshalb zunimmt, weil die planare Oberflächengitterführung mit Spiegelreflexion aufhört und zusätzliche Teilchen in die Kristalloberfläche eindringen. Die Stoßparameterabhängigkeit der Elektronenproduktion spielt hierfür keine Rolle.

Ebenso tritt das relative Minimum bei $\Theta = 0^\circ$ in allen Rechnungen deutlich auf, während die Strukturierung am Wendepunkt ($\Theta \approx 1^\circ$) mit zunehmendem a oder kleinerem b schwächer wird oder ganz verschwindet. Dies erlaubt den Schluß, daß auch für das Minimum bei $\Theta = 0^\circ$ Merkmale der Ionenreflexion, unabhängig von der Stoßparameterabhängigkeit der Elektronenproduktion, bedeutsam sind.

Schätzt man aus den Abbildungen 6.7a-c für festes L und a diejenigen b -Bereiche ab, für die Rechnung und Experiment verträglich sind, ergibt sich die Tabelle 6.1. Die aufgeführten Bereiche sind in Abbildung 6.8 nochmals in die a - b -Ebene eingetragen (x — x). Insgesamt kommt danach die gestrichelt umrandete Zone der a - b -Ebene für passende Parameterkombinationen in Betracht. Speziell für $L = 1$ nm gilt dagegen nur mehr die umpunktete Zone. Die eingezeichneten Linien für $L = 0,5$ nm, 1 nm und 2 nm deuten an, daß für eine bestimmte effektive freie Weglänge L ein kleineres a durch ein entsprechend ebenfalls kleineres b ausgeglichen werden kann.

Nun schließen sich, gewissermaßen in einem zweiten Durchgang, gezieltere Rechnungen an (Abb. 6.8, offene Dreiecke). Die Ergebnisse sind in Tabelle 6.2 aufgeführt. Der mögliche Parameterbereich wird damit auf das durchgezogen umrandete Gebiet in Abbildung 6.8 eingegrenzt, also auf $b = 0,8 \pm 0,1$ und $a = 0,2 \pm 0,05$ bei $L \approx 1$ nm. Eine weitere Eingrenzung ist aufgrund des einfachen Modellwirkungsquerschnitts (5.32) der Elektronenanregung nicht aussagekräftig, da sich die Kurven dann nur mehr in Einzelheiten der Strukturierung unterscheiden.

Tabelle 6.1 : Abschätzung passender Parameterbereiche aus den Abbildungen 6.7a-c.

L	a	in Frage kommender b-Bereich		
		aus der Halbwertsbreite	aus $I_{t,max}/I_{t,ran}$	Durchschnitt
0,5nm	0,2	---	---	---
	0,3	0,7-1,0	0,5-0,75	0,7-0,75
	0,4	---	---	---
1 nm	0,0	0,4-0,5	> 0,6	---
	0,1	0,45-0,75	0,65-0,9	0,65-0,75
	0,2	0,6-0,8	0,7-1,0	0,7-0,8
	0,3	0,65-1,0	0,9-1,0	0,9-1,0
	0,4	---	---	---
2 nm	0,0	---	---	---
	0,1	0,5-0,9	0,9-1,0	0,9
	0,2	---	---	---

Tabelle 6.2 : Ergebnisse zur Einengung des Parameterbereichs.
($He^+(200keV) \rightarrow Ni(110), [1\bar{1}0]$, sauber,
 $\phi = 1,1^\circ$, $s = 100$, $T = 450$ K)

a	b	L[nm]	$I_{t,max}/I_{t,ran}$	Halbw.-breite	Bemerkungen
0,3	0,75	0,5	1,75	<3,2°	abweich.Kurvenform
		1,0	2,4	3,2°	---
0,3	0,95	0,5	1,45	---	abweich.Kurvenform
		1,0	2,1	3,3°	---
		1,5	2,5	3,2°	---
0,2	0,95	1,0	1,9	4,1°	zu starke Schultern
		1,5	2,3	3,9°	---
		2,0	2,6	3,8°	---
0,15	0,9	1,0	1,8	---	abweich.Kurvenform
		1,5	2,1	3,8°	zu starke Schultern
0,1	0,8	1,0	1,85	4°	---
		1,5	2,2	4°	---
		2,0	2,5	3,9°	---
0,1	0,7	0,5	1,55	---	abweich.Kurvenform
		1,0	2,1	3,7°	---
		1,5	2,6	3,6°	---

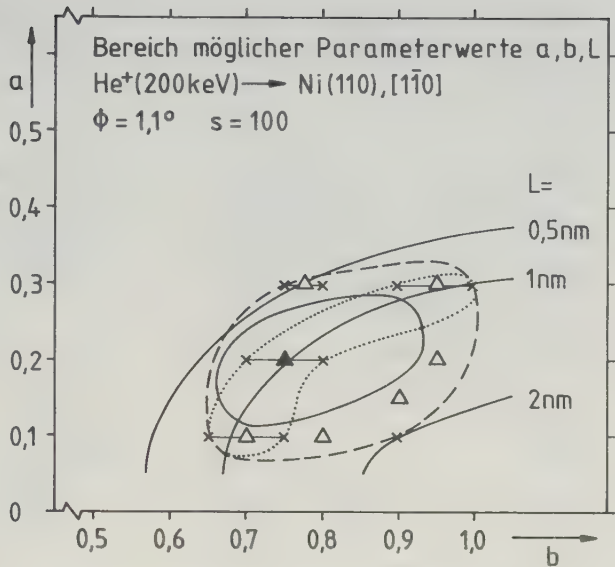


Abb.6.8 : Δ bezeichnet Rechnungen zur Einengung des Parameterbereichs (Tab. 6.2). $\blacktriangle$ ist der für die Diskussion verwendete Wert.

6.1.2. Ionenflußdichteverteilungen und Entstehungstiefepprofile

Nach Festlegung sämtlicher Programmparameter kann die abschließende Diskussion der Messung aus Abbildung 6.1a anhand berechneter Ionenflußdichteverteilungen (Abbn.6.9a-g) und nach Entstehungstiefen aufgelöster Sekundärelektronenproduktionsraten (Abbn.6.10a,b) erfolgen. Die gezeigten Flußdichteverteilungen erfassen etwa 2/3 des Bereichs der effektiven freien Weglänge von $L = 1 \text{ nm}$. In Abbildung 6.11 wird die mit der Austrittswahrscheinlichkeit gewichtete Sekundärelektronenproduktion der ersten beiden Atomlagen mit der der tieferliegenden Schichten verglichen.

Im Randomfall $\theta = 5^\circ$ (Abb.6.9g) liegt für $\text{He}^+(200\text{keV})$ und $\phi = 1,1^\circ$ planare Oberflächengitterführung vor. Unter der Kristalloberfläche findet man nur Flußdichten von $0,3-0,5 < 1$ durch Teilchen, die an Stufen eingefangen wurden. Die meisten Projektile werden an der Oberfläche nach vergleichsweise wenigen Stößen (kleines m_1 , Abb.4.4) spiegelreflektiert. Die mittlere Stoßzahl spiegelreflektierter Teilchen ergibt sich für $\theta = 5^\circ$ im Programm zu 570 (vom Start bis zum Abbruch, also mit An- und

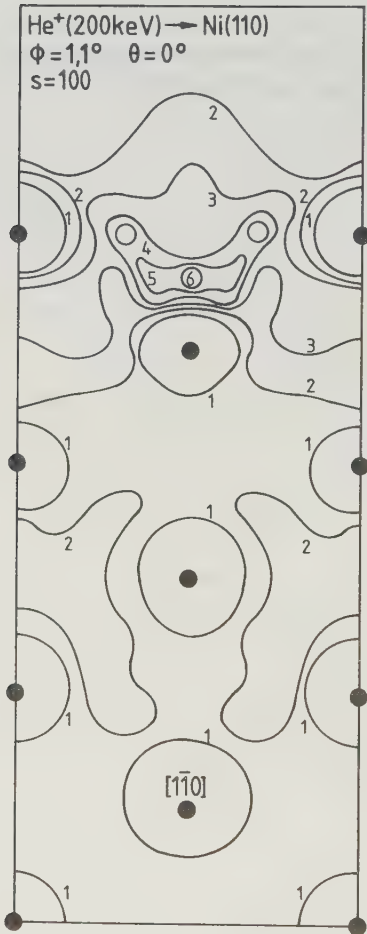


Abb. 6.9a

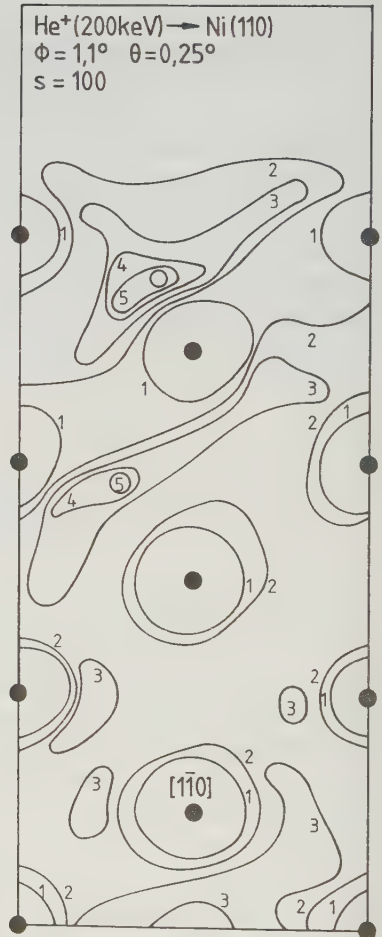


Abb. 6.9b

Abbn. 6.9a-g : Ionenflußdichteverteilungen von He⁺(200keV)-Ionen an einer sauberen Ni(110)-Oberfläche für verschiedene Einschußwinkel $0^\circ \leq \theta \leq 5^\circ$ zur $[1\bar{1}0]$ -Richtung, dargestellt in einer Ebene senkrecht zu $[1\bar{1}0]$. ϕ beträgt $1,1^\circ$ wie in Abb. 6.1b, Stufenparameter $s=100$, Temperatur $T=450$ K. Gezeigt sind Linien gleicher Flußdichte. Die angegebenen Flußdichtewerte sind auf die einfallende Flußdichte bezogen. Die elektronischen Parameter haben auf den Ionenfluß nur geringen Einfluß.

● : Position der Ni-Atomketten; Atomkettenabstände siehe Abb. 4.2

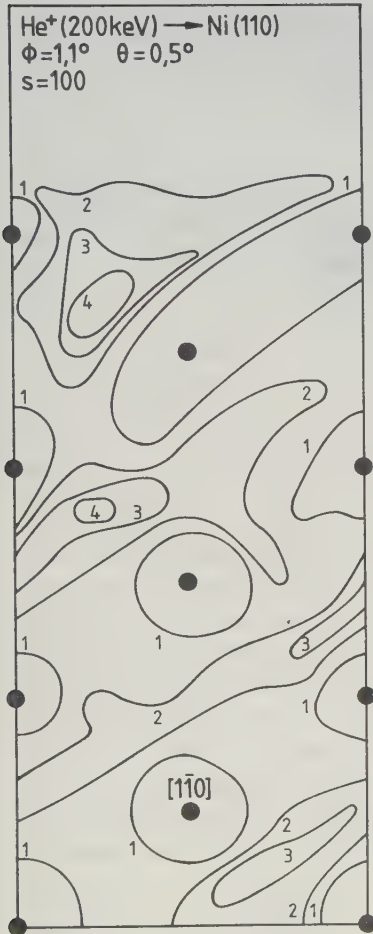


Abb. 6.9c

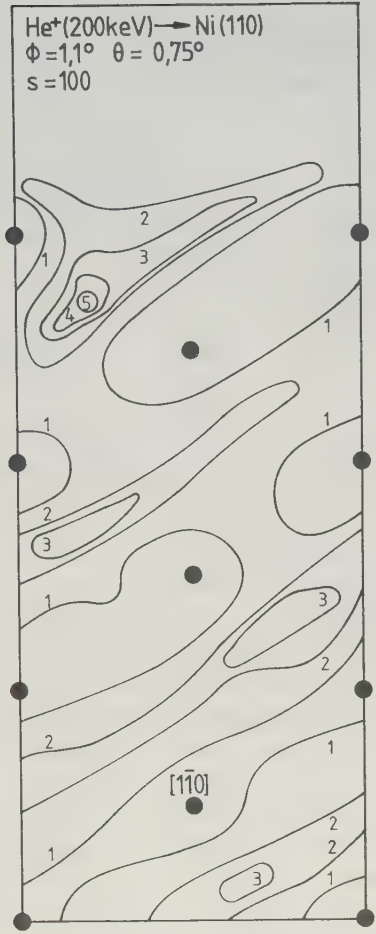


Abb. 6.9.d

Wegflug), ihr mittlerer Energieverlust zu 13 keV, in ausgezeichneter Übereinstimmung mit Messungen von List [18].

Die Flußdichte steigt über der obersten Atomlage auf 2-3 an.

In allen dargestellten Flußdichteverteilungen ist die Ionenflußdichte im gesamten Raum oberhalb des Kristalls, auch weit über der Oberfläche, größer als 1. Hier addiert sich nämlich die Flußdichte des einfallenden Strahls (=1, da auf sie normiert wird) und die Flußdichte gestreuter Teilchen. Bei perfekter

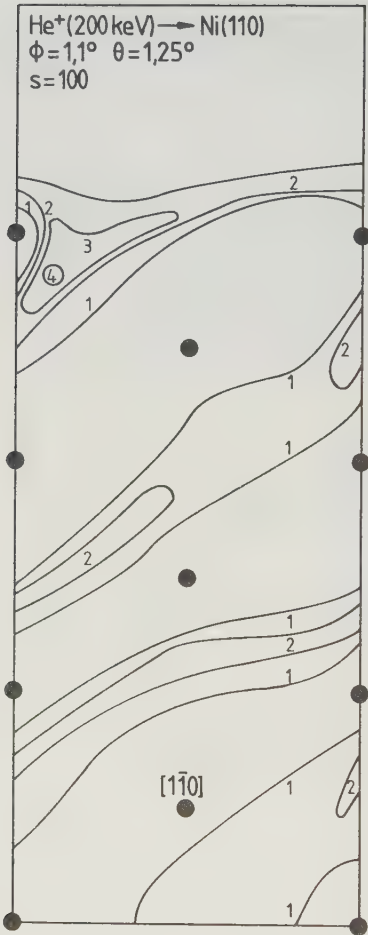


Abb. 6.9e

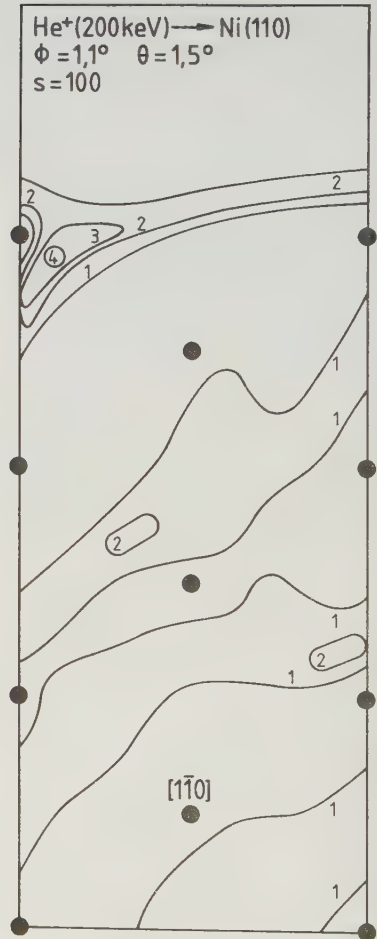
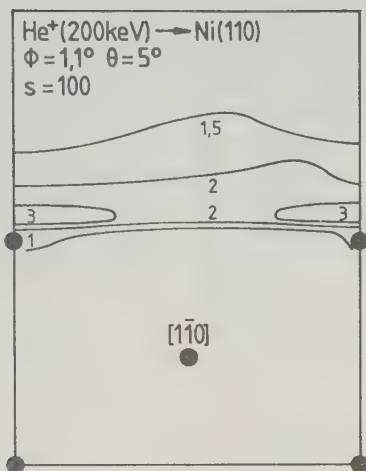


Abb. 6.9f

Reflexion aller eingeschossener Teilchen erwartet man die Fluß-
 dichte 2. Gehen Teilchen in den Kristall verloren, resultieren
 Werte >1 , aber <2 .

Für $|\theta| < \theta_{ap}$, ohne planare Oberflächengitterführung, dringt ein
 Fluß von 1-2 auch ins Kristallinnere ein. Gleichzeitig bildet
 sich, zunächst seitlich zur obersten Atomkette, durch axiale
 Gitterführung ein Flußdichtemaximum aus, das sich für $|\theta| < 1,5^\circ$
 mehr und mehr in die Mitte des obersten Semikanals verlagert,

Abb. 6.9g



bis man schließlich bei $\theta = 0^\circ$ volle Fokussierung über der Atomkette der zweiten Atomlage hat. Diese Fokussierung konzentriert den Ionenfluß an der Oberfläche, verhindert im Vergleich zu $\theta = 0,25^\circ$ und $\theta = 0,5^\circ$ die Entstehung ausgeprägter Flußdichtemaxima unterhalb der zweiten Atomlage und führt zum Reflexionsmaximum bei $\theta = 0^\circ$. Die hier reflektierten Teilchen erleiden aber im Mittel mehr Stöße, als bei der planaren Oberflächengitterführung bei $\theta = 5^\circ$, nämlich ca. 1200 (wieder vom Start bis zum Abbruch). Dies drückt sich in der bis zu 6-fachen Flußdichteüberhöhung aus. Ebenso ist der berechnete Energieverlust der gestreuten Teilchen mit 20 keV höher, als im Randomfall (übereinstimmend mit [18]).

Betrachtet man die Sekundärelektronenproduktion für $\theta = 5^\circ$ (Abbn. 6.10b und 6.11), sieht man, daß aufgrund der planaren Oberflächengitterführung sehr viele Elektronen aus der obersten Atomlage stammen. Die hohe Ionenflußdichte über den obersten Atomketten durch planare Oberflächengitterführung geht mit kleiner werdendem θ in das Flußdichtemaximum seitlich der obersten Kette über, wobei die Elektronenproduktion der beiden obersten Atomlagen bis herab zu $\theta = 2^\circ$ konstant bleibt (Abb. 6.11). Erst mit der Verlagerung dieses Maximums in die Kanalmitte zwischen

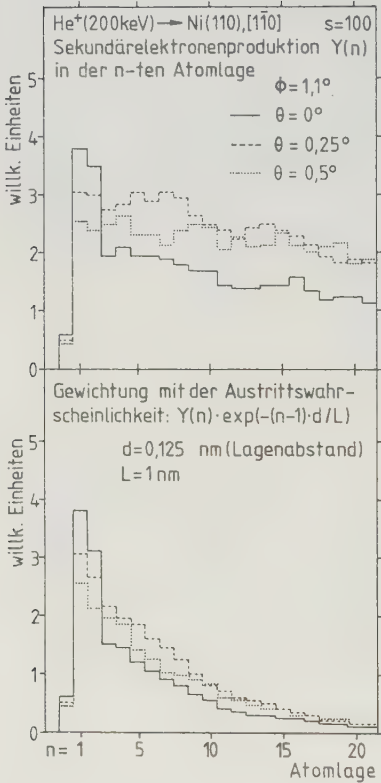


Abb. 6.10a

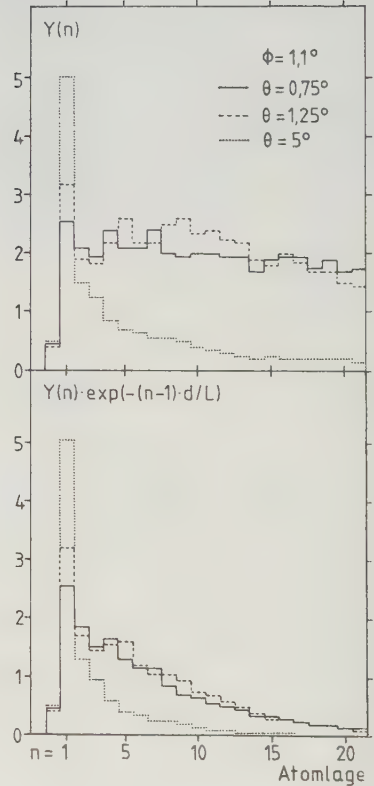
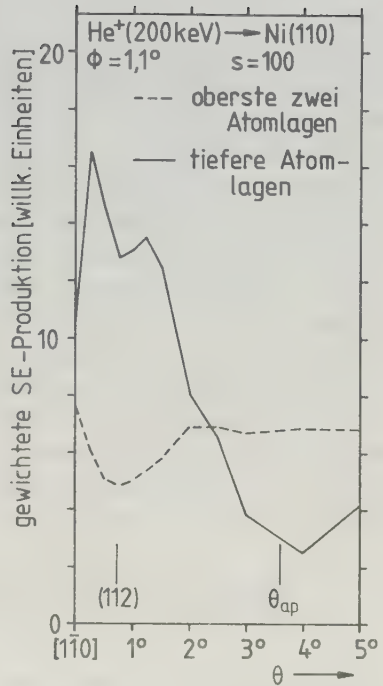


Abb. 6.10b

Elektronische Parameter : a=0,2, b=0,75; T=450 K.

den obersten Atomketten ($1,5^\circ > \theta > 0,5^\circ$), also in Gegenden geringerer Elektronendichte und geringerer Elektronenanregungswahrscheinlichkeit nach (5.32), sinkt die Elektronenproduktion. Mit beginnender Fokussierung um $\theta = 0^\circ$ steigt sie dann wieder an. Da durch die Fokussierung die Flußdichtemaxima unterhalb der zweiten Atomlage, wie sie beispielsweise für $\theta = 0,25^\circ$ auftreten, entfallen, ist mit dem Maximum der Elektronenproduktion der obersten beiden Lagen jedoch ein Rückgang der Elektronenproduktion aus den tieferen Lagen verbunden (Abb. 6.11).

Abb.6.11 : Mit der Austrittswahrscheinlichkeit gewichtete Sekundärelektronenproduktion (vgl. Abb. 6.10a,b) der beiden obersten Atomlagen ($n = 1, 2$) zusammen und der tieferen Atomlagen ($n \geq 3$) zusammen.
Elektronische Parameter :
 $a=0,2$, $b=0,75$, $L=1$ nm; $T=450$ K



Das gemessene und berechnete relative Minimum der SEE bei $\theta = 0^\circ$ tritt auf, weil hier dieser Rückgang überwiegt. Dieses Minimum ist also dadurch bedingt, daß Ionen wegen der Fokussierung und der späteren Reflexion nicht genügend tief in den Kristall eindringen und nicht genügend lange in der Kristalloberfläche verweilen. Schon bei $\theta = 0,25^\circ$ findet man dagegen erstens um 20% weniger Reflexion und zweitens führen selbst die reflektierten Teilchen im Mittel etwa 1600 Stöße, statt nur 1200 wie bei $\theta = 0^\circ$, aus. Das Minimum bei $\theta = 0^\circ$ ist auch kein Effekt planarer Gitterführung, da $\psi = \phi = 1^\circ < \psi_{\min, (001)} = 1,5^\circ$. Schließlich erkennt man deutlich (Abb.6.11), daß der Anstieg der SEE für $|\theta| \leq \theta_{ap} \approx 3,5^\circ$ gerade mit dem Einsetzen der Elektronenproduktion auch aus tieferen Lagen einsetzt, also mit dem Eindringen von Projektilen nach Aufhören der planaren Oberflächengitterführung.

Der Wendepunkt, experimentell bei $\theta = 0,7^\circ$ erscheint in der direkten Rechnung (Abb.6.1b) als Maximum bei $\theta = 1,25^\circ$ und

Minimum bei $\theta = 0,75^\circ$. Dieses Minimum ergibt sich einerseits aus dem Minimum der Elektronenproduktion der obersten beiden Atomlagen (Abb.6.11). Hier fällt das Maximum der Ionenflußdichte genau ins Minimum der Elektronendichte zwischen den Ketten (Abb.6.9d). Zum zweiten findet sich ein kleineres Minimum auch in der Elektronenproduktion tieferer Schichten (Abb.6.11). Auch dort herrschen offenbar große Stoßparameter vor. Die Wendepunktstruktur hat jedenfalls mit der relativen Lage von Flußdichtemaxima und Elektronendichteminima zu tun. Das erklärt, warum ihre Ausprägung merklich von der Wahl der Parameter a und b , sowie von anderen Modellannahmen (Abschnitt 6.1.3) abhängt. Es erklärt auch, warum sie in der Rechnung mit dem einfachen Elektronendichtemodell und im Experiment unterschiedlich stark in Erscheinung tritt.

6.1.3. Einfluß von Oberflächenrauigkeit, Temperatur und Elektronendichteausläufer

Anhand der Ionenreflexionskurve wurde Φ und der Stufenparameter s festgelegt, dann darauf aufbauend ein Modell für die Elektronenemission durch Bestimmung der Parameter a , b und L entwickelt. Nun kann umgekehrt die Auswirkung der Stufen auf die SEE im Rahmen dieses Modells untersucht werden.

Abbildung 6.12 zeigt dazu die berechnete relative SEE-Ausbeute bei Einschluß entlang $[1\bar{1}0]$ für verschiedene Werte des Stufenparameters s . Die elektronischen Parameter und der Winkel Φ bleiben jetzt gleich. Man sieht den drastischen Einfluß der Oberflächenrauigkeit auf den Targetstrom, sowohl in der relativen Höhe des Maximums, als auch in der Ausprägung des Minimums bei $\theta = 0^\circ$:

Mit steigender Stufendichte nimmt $I_{t,max}/I_{t,ran}$ ab, ebenso die Tiefe des Minimums bei $\theta = 0^\circ$. Bei $s = 75$ ist diese Strukturierung sogar ganz verschwunden. Normiert man die Randomwerte in den Rechnungen zu verschiedenem s auf den Randomwert bei $s = 100$ und ebenso die Maximalwerte auf den Maximalwert bei $s = 100$ ($s = 100$ liefert die zum Experiment passende Kurve), erhält man das Ergebnis aus Abbildung 6.14 oben. Während die so normierten

Abb.6.12 : Abhängigkeit der relativen SEE-Profile vom Stufenparameter s . Die sonstigen Parameter bleiben unverändert.

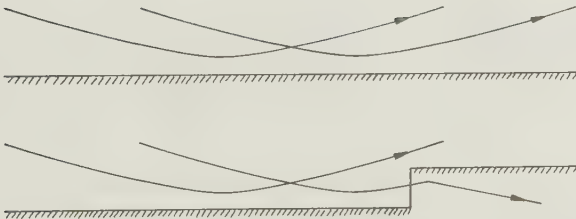
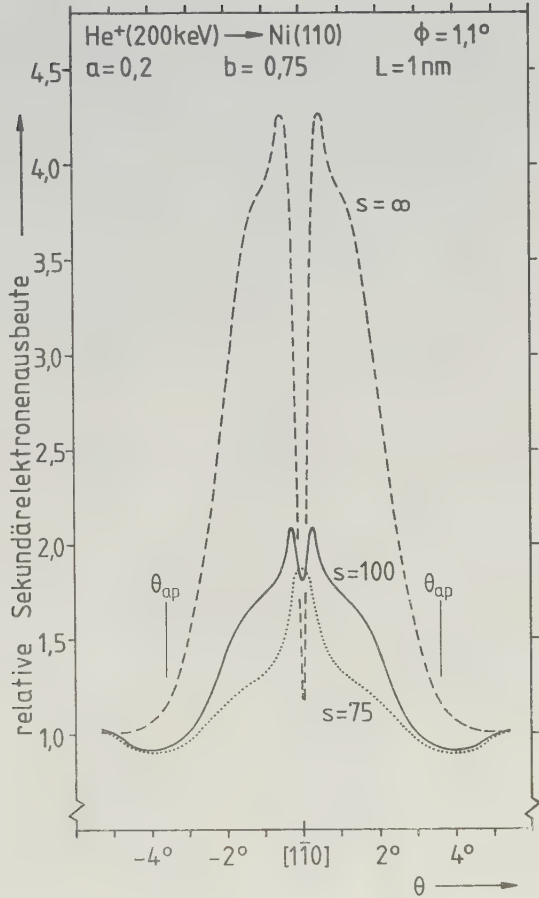
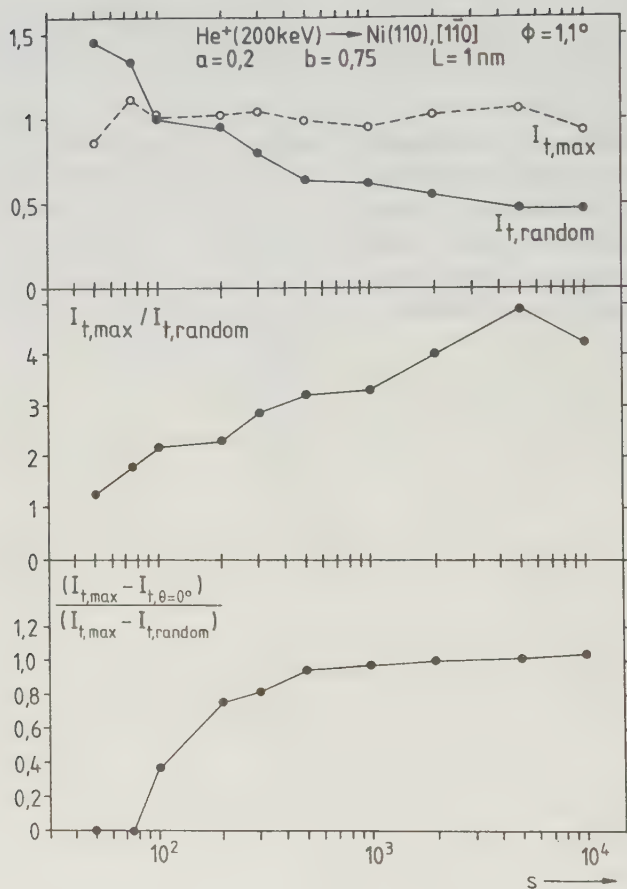


Abb.6.13 : Schematische Darstellung der Wirkungsweise von Stufen bei planarer Oberflächengitterführung. Die Stufen können Teilchen einfangen.

Abb. 6.14



Maximalwerte $I_{t,\text{max}}$ fast konstant bleiben, nehmen die entsprechenden Randomwerte $I_{t,\text{ran}}$ mit abnehmendem Stufenabstand s deutlich zu. Damit erklärt sich der Anstieg des relativen SEE-Maximums $I_{t,\text{max}}/I_{t,\text{ran}}$ mit steigendem s (Abb.6.14 mitte) vornehmlich durch den Rückgang des Randomwertes $I_{t,\text{ran}}$. Ganz ohne Stufen werden bei perfekter planarer Oberflächengitterführung stets nur wenige Elektronen im Elektronendichteausläufer angeregt. Bei immer glatterer Oberfläche erhält man bei $\theta = \text{random}$ immer bessere Spiegelreflexion und immer weniger Teilchen dringen, durch Stufen eingefangen, in die oberen Atomlagen ein

(Abb.6.13) [11]. Die Elektronenproduktion geht zurück. Erneut ist die Bedeutung der Teilchenreflexion für die SEE ersichtlich.

Eine ähnliche Begründung ergibt sich für den Rückgang des relativen Minimums bei $\theta = 0^\circ$ mit wachsender Stufenzahl (Abb.6.14 unten). Bei glatter Oberfläche ist die Fokussierung auf die mittlere Atomkette im Semikanal perfekt [11] und es dringen keine Teilchen tiefer in den Kristall. Stufen stören zunehmend diese idealen Verhältnisse.

So gibt sowohl das relative SEE-Maximum, als auch das Auftreten und die Ausprägung des Minimums bei $\theta = 0^\circ$ ein Kriterium für die Qualität einer Kristalloberfläche ab.

In den Abbildungen 6.15 und 6.16 sind die Werte der Temperatur T und des Elektronendichteausläufers c (Abschnitt 5.5) variiert, um zu prüfen, wie empfindlich die Ergebnisse von deren Wahl und von den zugrundegelegten Modellvorstellungen abhängen.

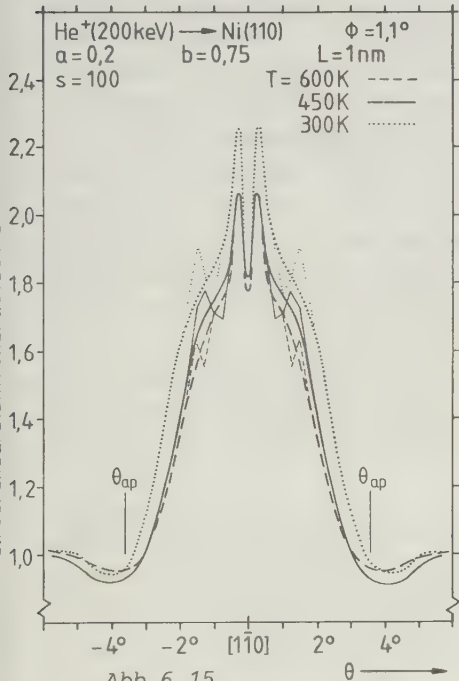


Abb. 6.15

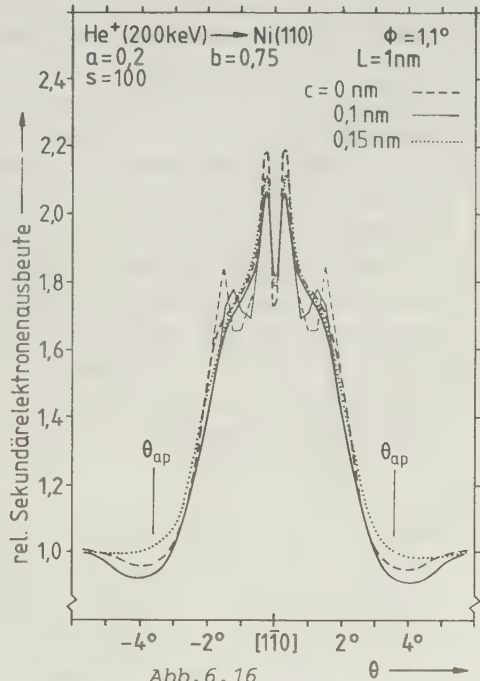


Abb. 6.16

Berechnete SEE-Profile für verschiedene Parameterwerte T und c .

6.2. $\text{He}^+(200\text{keV}) \rightarrow \text{Ni}(110), [001]$ und
 $\text{He}^+(200\text{keV}) \rightarrow \text{Ni}(110), [\bar{1}\bar{1}2]$

Bei der $[001]$ -Richtung der $\text{Ni}(110)$ -Oberfläche handelt es sich wie bei $[\bar{1}\bar{1}0]$ um eine Semikanalrichtung (Abb.4.2). Dementsprechend ergeben sich hier, abgesehen von veränderten Gitterparametern, für SEE und Teilchenreflexion ganz ähnliche Verhältnisse (Abbn.6.17a,b). Insbesondere findet man wieder ein Fokussierungsmaximum reflektierter Ionen und das dazugehörige relative Minimum der SEE-Ausbeute bei $\theta = 0^\circ$. Eine Beteiligung planarer Gitterführungseffekte am Zustandekommen dieses Minimums kann wegen $\psi = \phi = 1^\circ < \psi_{\min}(\bar{1}\bar{1}0) = 1,8^\circ$ wieder ausgeschlossen werden. Eingezeichnet sind die Winkel $\theta_{\text{ap}} = 2,57^\circ$ und $\theta_{\text{C}} = 2,5^\circ$.

In der Computersimulation wird der Stufenparameter s derart gewählt, daß der Stufenabstand $2s \cdot D_{[001]}$ (Abschnitt 4.2.3), damit die Neigung der geometrischen Kristalloberfläche zur kristallographischen (110) -Ebene, dem der $[\bar{1}\bar{1}0]$ -Richtung gleicht ($s = 75$). Der Wert des elektronischen Parameters $a = 0,15$ ist etwas kleiner, der von $b = 0,8$ etwas größer als bei $[\bar{1}\bar{1}0]$, sonst errechnet sich ein höheres Maximum der SEE. Weitere Veränderung bringt keine nennenswerte Verbesserung mehr. Obwohl die gewählten Werte damit innerhalb des abgegrenzten Bereichs aus Abbildung 6.8 liegen, werden doch Grenzen des einfachen Modellwirkungsquerschnitts (5.32) deutlich.

Bei $\theta = \theta_{(010)} = 1^\circ$ erkennt man einen flachen Wendepunkt. Im Gegensatz zum Wendepunkt bei $[\bar{1}\bar{1}0]$ läßt er sich mit einsetzender planarer Gitterführung entlang (010) erklären, da hierbei $\psi = 1,4^\circ > \psi_{\min, (010)} = 1,1^\circ$.

Das SEE-Ausbeuteprofil entlang $[\bar{1}\bar{1}2]$ (Abbn.6.18a,b) ähnelt ebenfalls den Kurven für $[\bar{1}\bar{1}0]$ und $[001]$. Der Anstieg setzt wieder bei $|\theta| = \theta_{\text{ap}} = 2,1^\circ$ ein, durch das Eindringen von Ionen in die Kristalloberfläche mit dem Ende planarer Oberflächengitterführung (Abb.6.20, analog zu Abb.6.11). Bei $\theta = 0^\circ$ liegt ein relatives Minimum vor, θ_{C} beträgt $\theta_{\text{C}} = 2,25^\circ$.

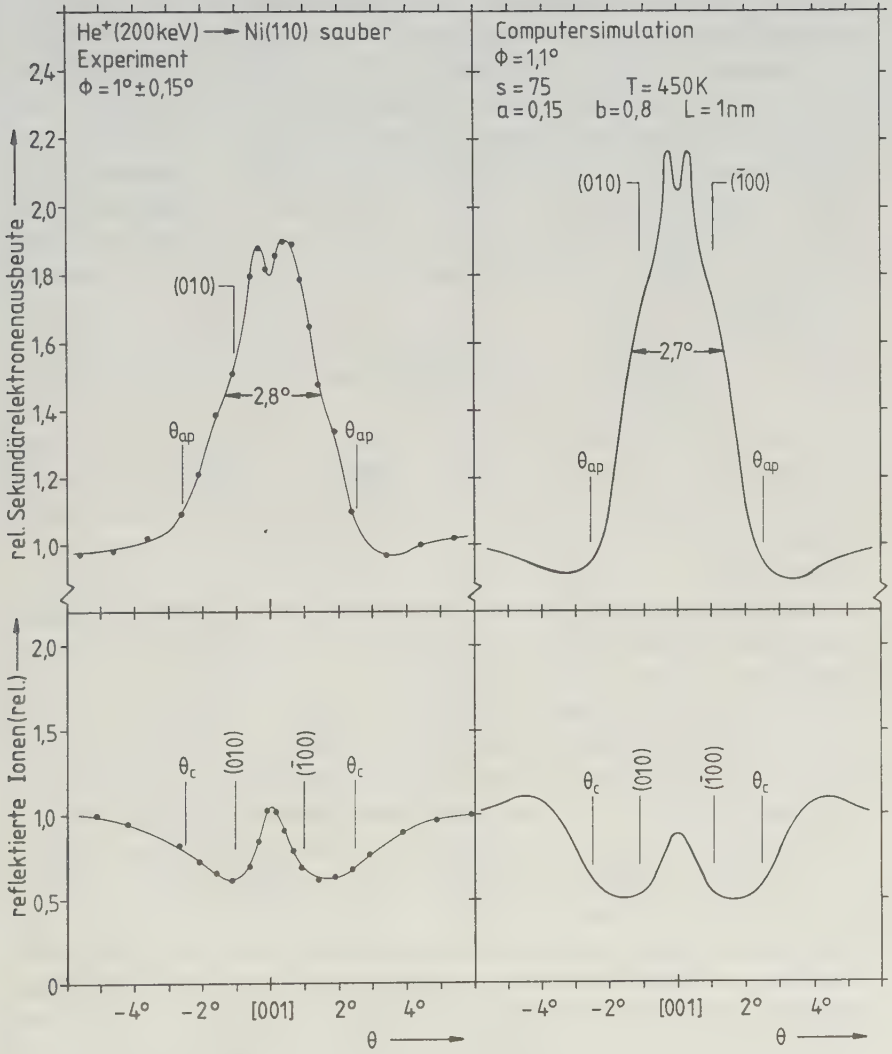


Abb. 6. 17a

Abb. 6. 17b

$[1\bar{1}2]$ ist jedoch keine Semikanalrichtung (Abb.4.2). Bei $\Theta = 0^\circ$ tritt keine Fokussierung auf eine tieferliegende Atomkette auf, sondern die Teilchen werden planar entlang $(\bar{1}11)$ ins Kristallinnere geführt: $\Psi = \Phi = 1^\circ > \Psi_{\min,(\bar{1}11)} = 0,7^\circ$. Demgemäß resultiert in der Reflexionsausbeute bei $\Theta = 0^\circ$ ein Minimum, nicht wie bei $[1\bar{1}0]$ und $[001]$ ein Maximum. Auch die Ionenflußdichteverteilungen (Abbn.6.19a-d) unterscheiden sich, abgesehen natürlich vom Randomfall ($\Theta = 4^\circ$), von denen etwa entlang $[1\bar{1}0]$. Neben einem Flußdichtemaximum in der obersten Atomlage durch axiale Gitterführung sieht man deutlich die planar geführte Flußkomponente.

Der Wert des Stufenparameters $s = 60$ ist wieder so festgelegt, daß der Stufenabstand $2s \cdot D_{[1\bar{1}2]}$ mit dem aus der $[1\bar{1}0]$ - und der $[001]$ -Richtung übereinstimmt.

In der Reflexionsausbeute tritt bei $\Theta = \Theta_{(021)} = 0,8^\circ$ ein Maximum auf. Planare Effekte können hierfür keine Rolle spielen, da $\Psi = 1,3^\circ < \Psi_{\min,(021)} = 3^\circ$. Dieses Maximum erscheint für größere Einschubwinkel Φ klarer und wird in Abschnitt 6.3 diskutiert.

Auch das relative SEE-Minimum bei $\Theta = 0^\circ$ ist mithin diesmal kein Fokussierungseffekt. Es entsteht, da sowohl das Flußdichtemaximum in der ersten Atomlage als auch der Fluß planar geführter Teilchen genau zwischen den $(\bar{1}11)$ -Ebenen liegt, im Bereich geringer Elektronendichte und somit geringer Elektronenproduktion nach (5.32). Dazu kommt, daß die planar geführten Teilchen schnell tief unter die Oberfläche vordringen und auch so weniger zur SEE beitragen. Abbildung 6.20 zeigt, daß bei $\Theta = 0^\circ$ sowohl ein Rückgang der Elektronenproduktion der oberen, wie der tieferen Lagen eintritt.

Die Werte a und b liegen im abgegrenzten Bereich aus Abbildung 6.8. In die Rechnung Abbildung 6.18b mußte ein Defektparameter $d \neq 0$ eingeführt werden (Abschnitt 4.2.3). Ohne diesen Parameter d fällt das Minimum bei $\Theta = 0^\circ$ wesentlich übertrieben aus (Abb.6.21). Trotz Oberflächenstufen wird ja mit $d = 0$ die planare Gitterführung entlang $(\bar{1}11)$ ideal gerechnet. Die Ausprägung des Minimums bei $\Theta = 0^\circ$ nimmt mit Erhöhung der Stufendichte sogar noch zu (Abb.6.22), da dann immer mehr Teilchen

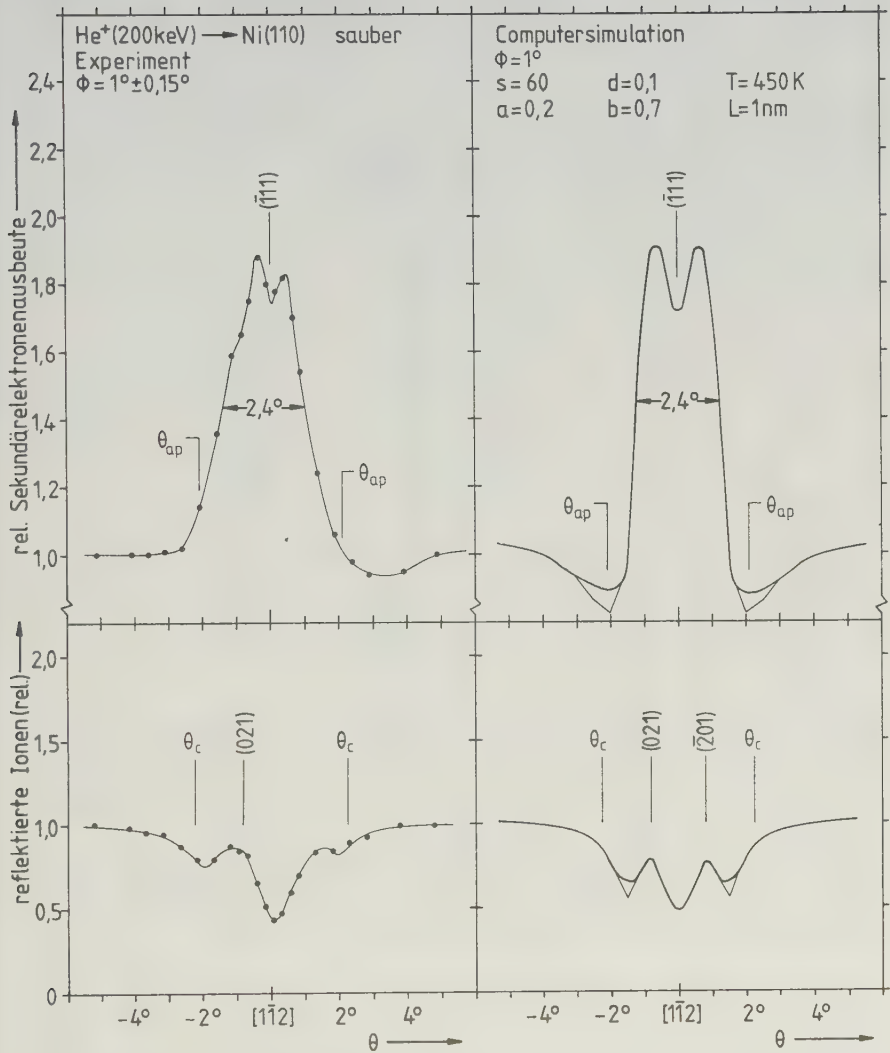
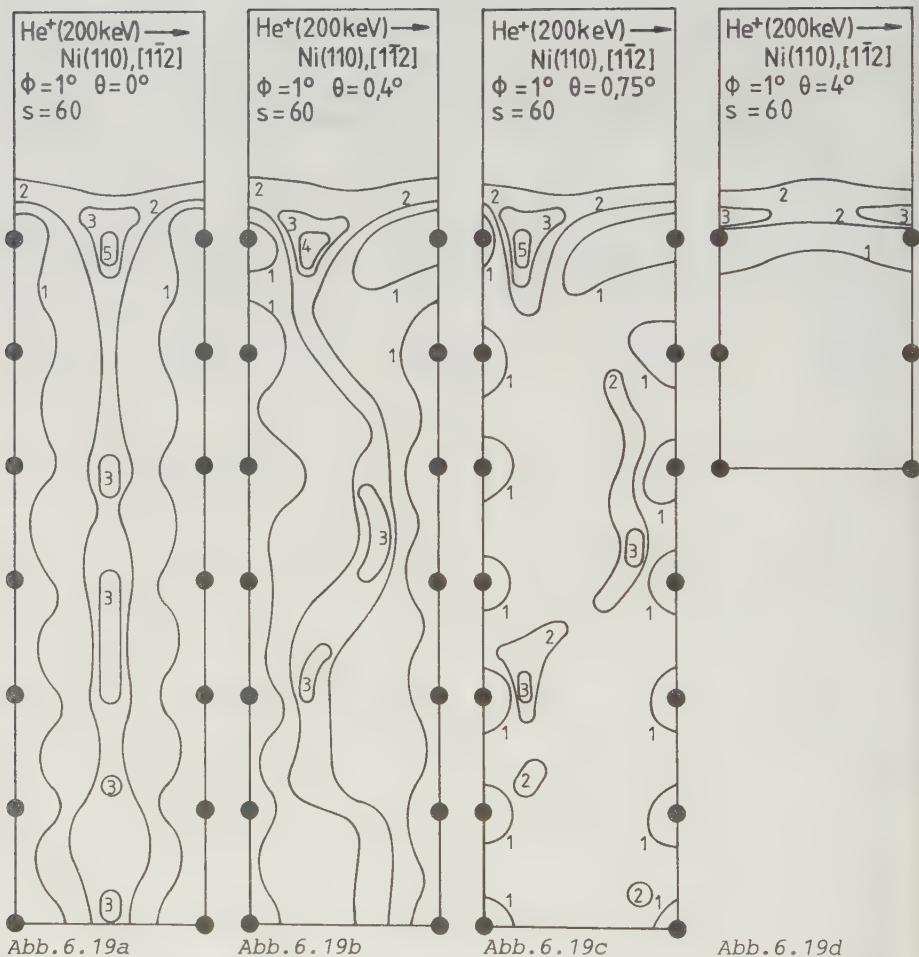


Abb. 6. 18a

Abb. 6. 18b



Ionenflußdichteverteilungen bei Einschluß entlang [11̄2], dargestellt in einer Ebene senkrecht zu [11̄2]. $T = 450 \text{ K}$, $d = 0$

eingefangen werden und durch die idealen planaren Kanäle ins Volumen verlorengehen.

Stufen sind zwar auch nötig, etwa um die Höhe des normierten SEE-Maximums richtig wiederzugeben (durch Verringerung der Spiegelreflexion im Randomfall). Zur Einschränkung planarer Gitterführung ins Volumen sind sie wirkungslos.

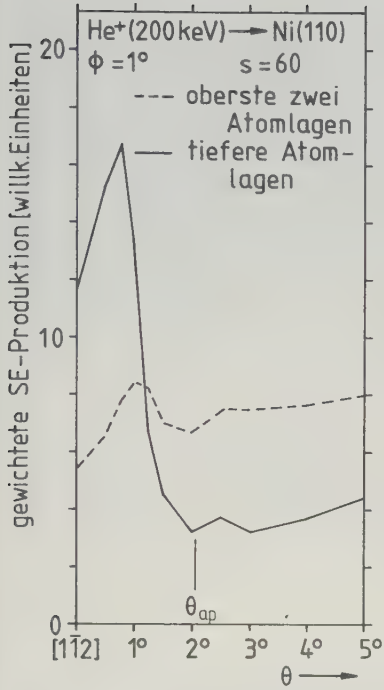


Abb. 6.20 : $a = 0,2$; $b = 0,7$; $L = 1 \text{ nm}$

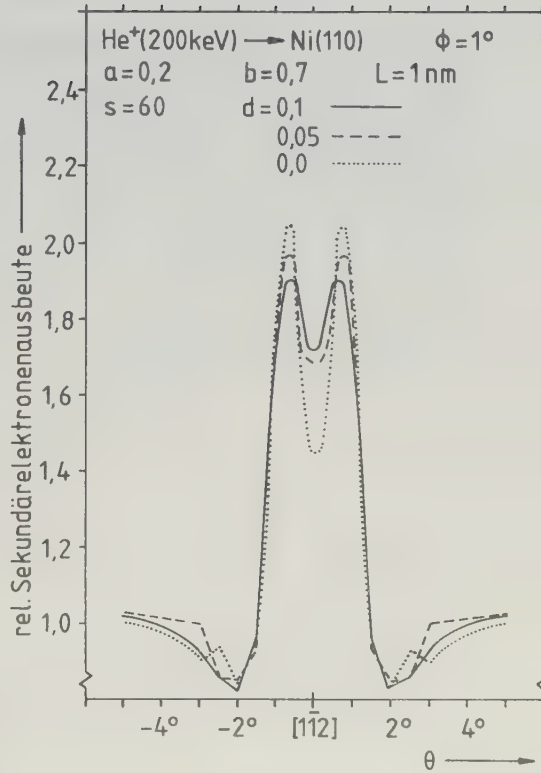
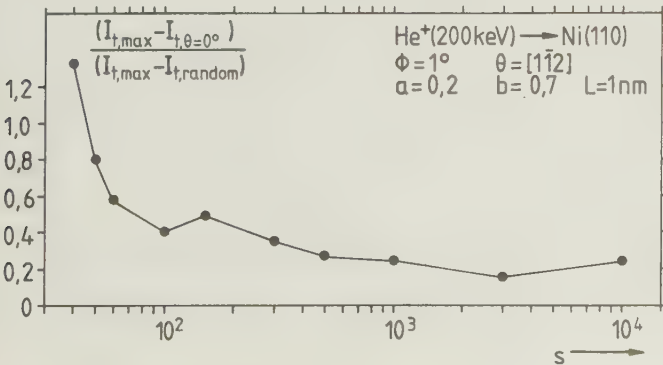


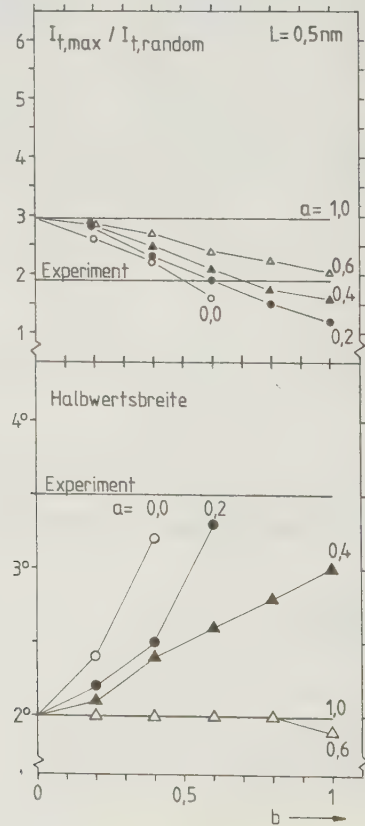
Abb. 6.22 (unten) : Ausprägung des Minimums bei $\theta = 0^\circ$ für verschiedene s bei $d = 0$.

Abb. 6.21 : Ausprägung des Minimums bei $\theta = 0^\circ$ für verschiedene d bei $s = 60$.



Es läßt sich einwenden, daß nicht die Idealisierung der Flußdichte, sondern eine falsche Wahl der Parameter a und b das zu tiefe Minimum bei $\Theta = 0^\circ$ bewirkt. Variiert man deshalb a und b nochmals über einen weiten Bereich (Abb.6.23) sieht man, daß mit größerem a oder kleinerem b die Ausprägung des Minimums in der Tat zurückgeht. Jedoch entfernt sich dabei gleichzeitig insbesondere die relative Höhe des SEE-Maximums $I_{t,max}/I_{t,ran}$ wie auch die Halbwertsbreite immer mehr vom experimentellen Wert. So behebt man einen Mangel und schafft einen neuen, was bei Einführung von $d \neq 0$ nicht der Fall ist.

Abb.6.23 : Ausprägung des Minimums, volle Halbwertsbreite und $I_{t,max}/I_{t,ran}$ bei Änderung der Parameter a und b . $s = 60$, $d = 0$



6.3 SEE für verschiedene Einschußwinkel ϕ

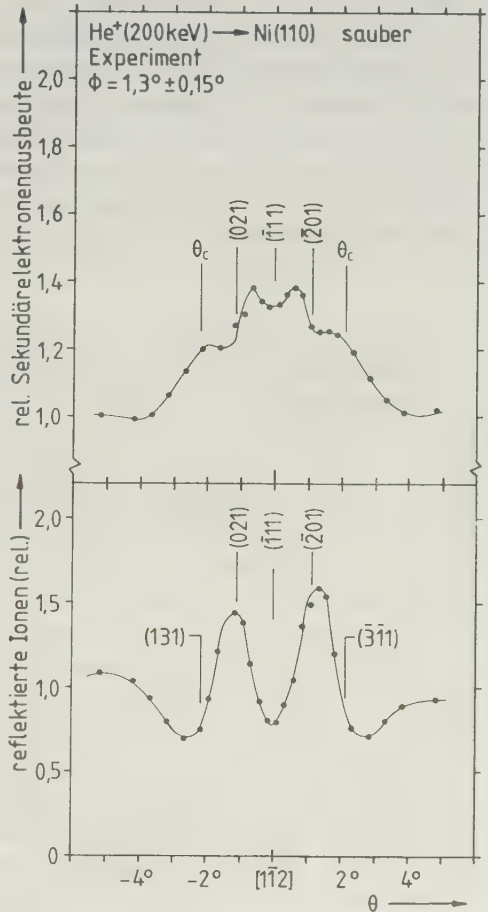
Für steileren Einschuß von $\phi = 1,3^\circ$ mit $\text{He}^+(200\text{keV})$ entlang $\text{Ni}(110)$, $[1\bar{1}2]$ tritt, wie bereits erwähnt, das Maximum der Reflexionsausbeute bei $\theta = \theta_{(021)} = 1,07^\circ$ wesentlich klarer in Erscheinung als bei $\phi = 1^\circ$ (Abb.6.24). Gleichzeitig findet man bei diesem Winkel jetzt Minima in der SEE-Ausbeute.

Abb.6.24

Tabelle 6.3

ϕ	$I_{t,\text{ran}}/I_0$ Elek./Ion	spiegel- refl. Ionen
1°	61 ± 3	$13 \pm 2\%$
$1,3^\circ$	71 ± 2	$7 \pm 1\%$
$1,5^\circ$	78 ± 1	----
3°	66 ± 2	----

In den Tabellen 6.3-7.2 ist jeweils der gemessene Wert der Sekundärelektronenausbeute für $\theta = \text{random}$ angegeben sowie der gemessene Prozentsatz spiegelreflektierter Ionen ($\theta = \text{random}$), bezogen auf den einfallenden Strahl.



Dieses Zusammentreffen weist auf eine Fokussierung mit den in Abschnitt 6.1.2 für $[1\bar{1}0]$, $\Theta = 0^\circ$ beschriebenen Konsequenzen hin. Und zwar fokussieren die beiden obersten Atomketten A (Abb.4.2) auf die tieferliegende Kette B. Diese liegt in der Projektion längs (021), also längs der transversalen Einfallsrichtung der Teilchen für $\Theta = \Theta_{(021)}$, genau in der Mitte der beiden Ketten A, vorausgesetzt, die Oberfläche ist nicht relaxiert. Bei einer Relaxation der obersten Lage ist das für einen gegenüber $\Theta_{(021)}$ veränderten Winkel Θ der Fall. Damit kann aus der Lage von Fokussierungsminima in der SEE bei Einschuwinkeln $\Theta \neq 0^\circ$ grundsätzlich geschlossen werden, ob eine Relaxation vorliegt oder nicht, besonders wenn diese Minima stärker ausgeprägt sind, als in Abbildung 6.24 (wie z.B. in Abbn.6.27c-f). Allerdings ist dazu eine verbesserte Winkelgenauigkeit der Einstellung nötig, als sie hier mit $\pm 0,15^\circ$ erreicht werden konnte. Daneben bleibt das relative Minimum bei $\Theta = 0^\circ$ als Folge der

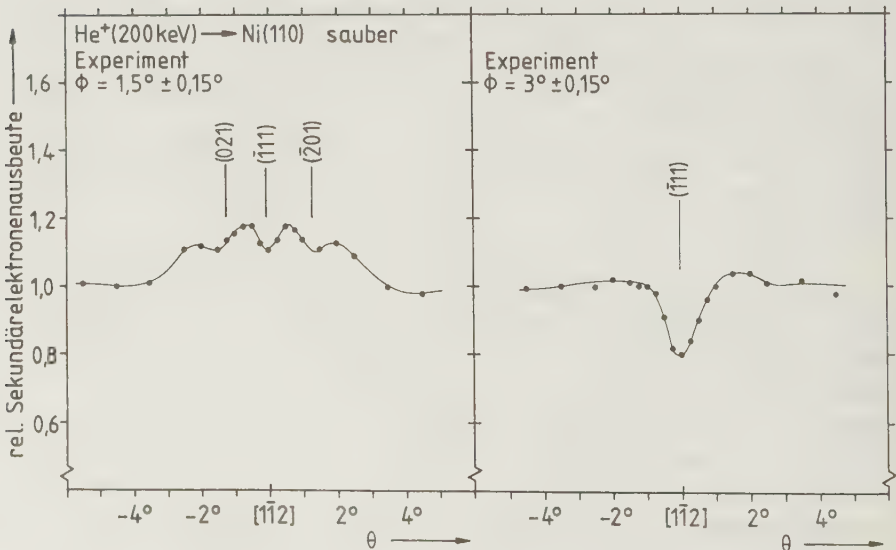


Abb. 6.25

Abb. 6.26

planaren Gitterführung bestehen. Es ist wegen des steileren Einschubwinkels sogar stärker geworden. Insgesamt verflacht die auf den Randomwert normierte SEE-Ausbeutekurve gegenüber der bei $\Phi = 1^\circ$. Das erklärt sich damit, daß wegen $\Phi = 1,3^\circ > \Phi_{sp} = 1,16^\circ$ die planare Oberflächengitterführung und die Spiegelreflexion nachlassen (Tabelle 6.3). Es dringen mehr Ionen unter die Kristalloberfläche und lassen so den Randomwert des Targetstroms anwachsen. Axial geführte Ionen (wegen $\Phi = 1,3^\circ < \psi_c = 2,5^\circ$) verweilen aber immer noch länger in den obersten Atomlagen als die unter $\Theta = \text{random}$ eingeschossenen Teilchen, die entweder ins Kristallvolumen verlorengehen oder nach einem Großwinkelstoß den Kristall wieder verlassen. Deshalb hat man bei Annäherung an die niederindizierte Richtung nach wie vor eine Zunahme der SEE, allerdings deutlich schwächer als im Fall $\Phi < \Phi_{sp}$.

Verflachung und Fokussierung setzen sich zu $\Phi = 1,5^\circ$ hin fort (Abb.6.25). Bei $\Phi = 3^\circ$ schließlich (Abb.6.26) hat man nur noch das planare Minimum bei $\Theta = 0^\circ$.

Eine ähnliche Abfolge von SEE- und Reflexionsprofilen (Abbn.6.27a-f) wurde für $H^+(100\text{keV}) \rightarrow \text{Ni}(110)$ längs $[1\bar{1}0]$ gefunden. Die relativen Ausbeutekurven zeigen die gleichen Merkmale wie die bei He^+ -Einschuß. Sie werden also hauptsächlich durch das vergleichbare Gitterführungsverhalten bestimmt, nicht durch die teilweise unterschiedliche Projektil-Elektronen-Wechselwirkung (z.B. bzgl. Plasmonenanregung). Die Absolutwerte der SEE-Ausbeute liegen für Protonen um etwa die Hälfte unter denen für He^+ (Abschnitt 6.1 und Tabelle 6.4). Das entspricht gerade dem niedrigeren elektronischen Energieverlust von H gegenüber He in Ni : $|(dE/ds)(H, 100\text{keV})| / |(dE/ds)(\text{He}, 200\text{keV})| = 0,48$ [49].

Die SEE-Kurve für $\Phi = 0,5^\circ$ (Abb.6.27a) besitzt ein prägnantes Fokussierungsminimum bei $\Theta = 0^\circ$, komplementär zum Maximum reflektierter Ionen. Dieses Maximum läßt für $\Theta = \Theta_{(111)} = 0,71^\circ$ eine Strukturierung ähnlich der in Abbildung 6.5 für $\Theta = \Theta_{(113)}$ erkennen. Planarer Teilchenverlust ins Volumen kann ausgeschlossen werden, da $\psi = 0,9^\circ < \psi_{\min, (111)} = 1,2^\circ$. So muß es sich um eine Änderung der Reflexionswahrscheinlichkeit handeln (z.B. um eine stärkere Aufstreuung der gestreuten Teilchen).

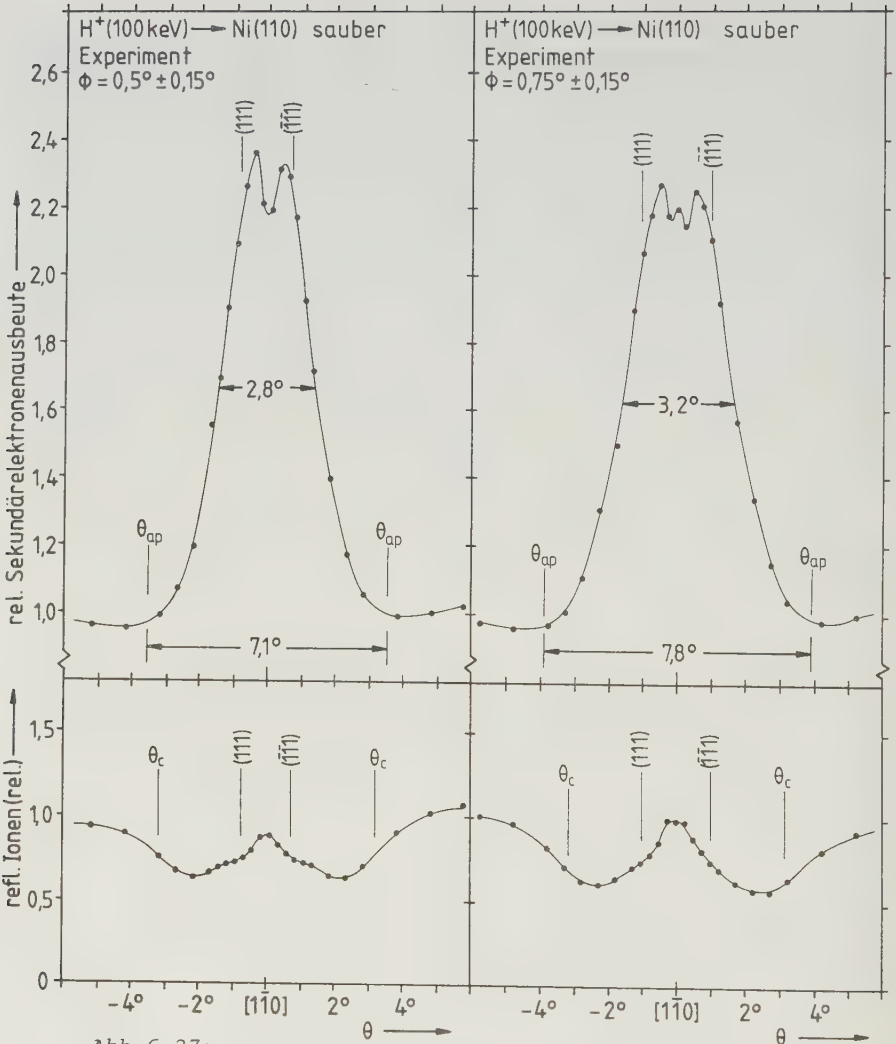


Abb. 6.27a

Abb. 6.27b

Tabelle 6.4

ϕ	$I_{t,ran}/I_0$ Elek./Ion	spiegel- refl. Ionen
$0,5^\circ$	28 ± 4	$28 \pm 4\%$
$0,75^\circ$	27 ± 3	$22 \pm 3\%$
1°	34 ± 3	$15 \pm 2\%$
$1,25^\circ$	39 ± 1	$12 \pm 1\%$

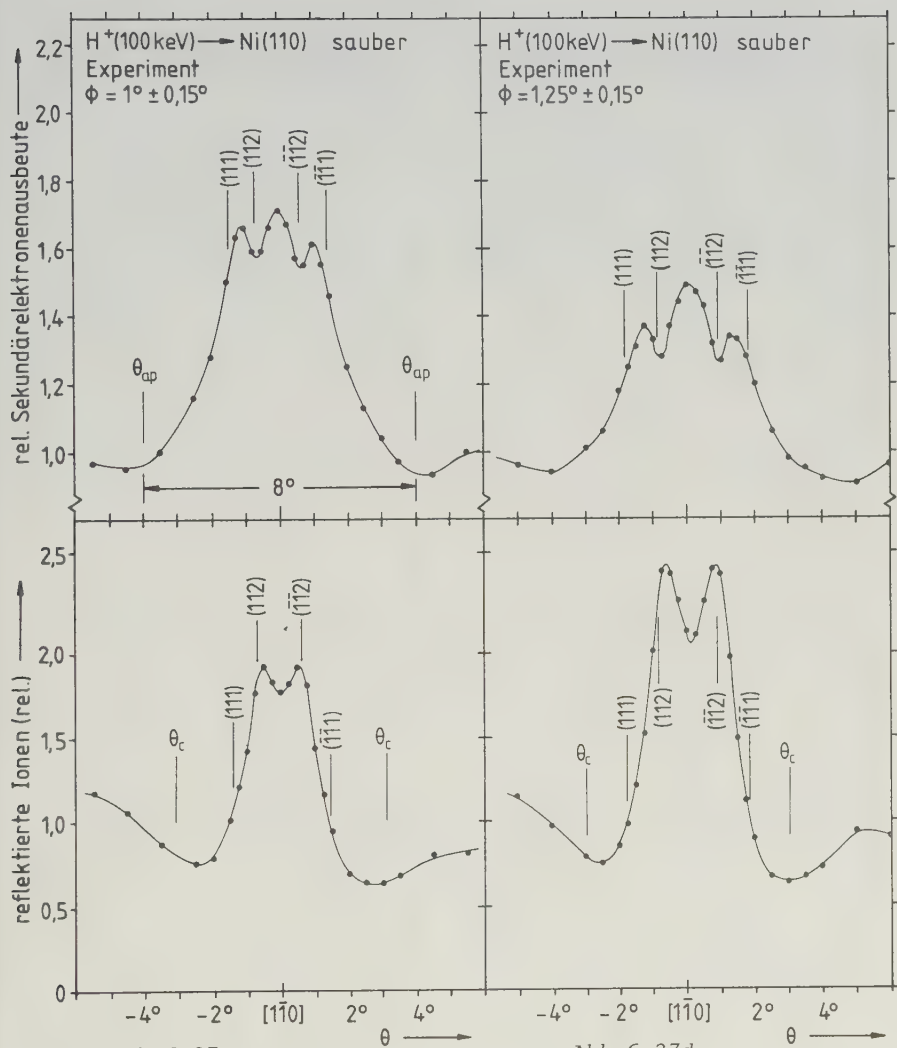


Abb. 6.27c

Abb. 6.27d

Tabelle 6.4
(Forts.)

Φ	$I_{t,ran}/I_0$ Elek./Ion	spiegel- refl. Ionen
$1,5^\circ$	44 ± 1	----
$1,75^\circ$	42 ± 1	$9 \pm 1\%$
2°	41 ± 1	$7 \pm 1\%$
$2,5^\circ$	37 ± 2	----

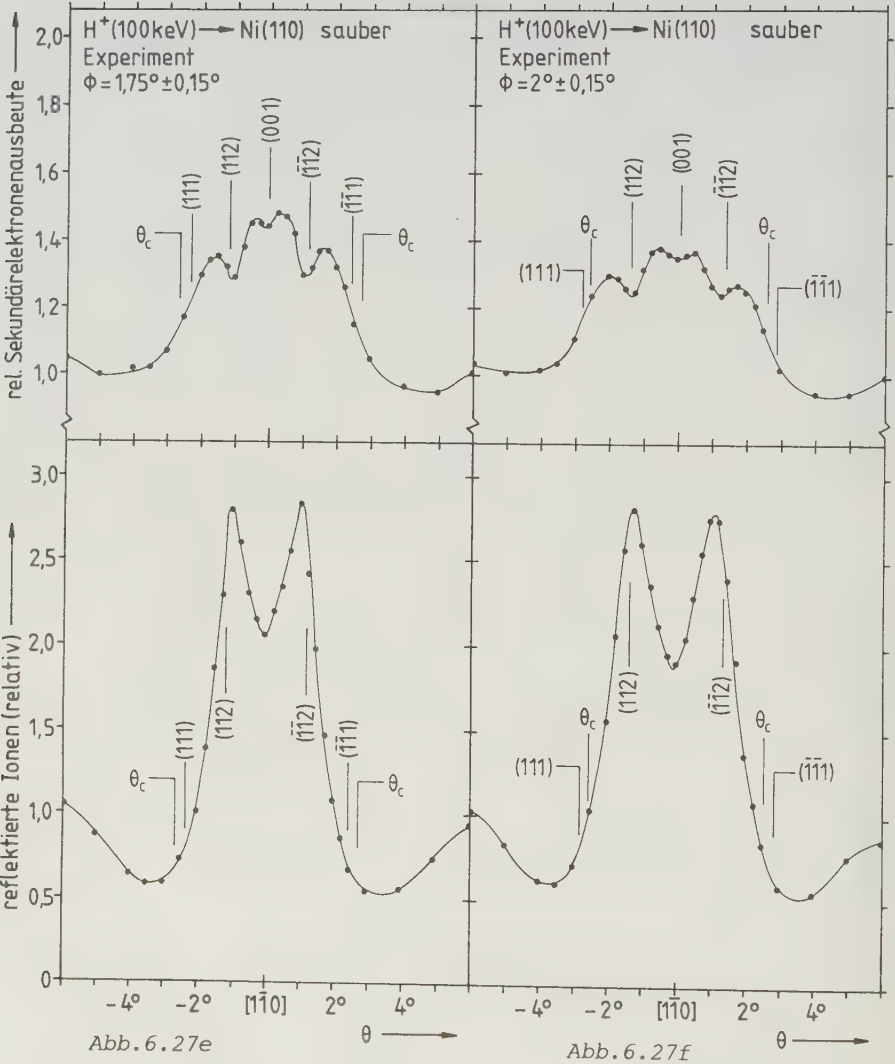
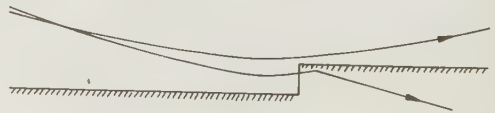


Abb. 6.28 : Auswirkung von Stufen bei verschiedenem $z_{\min}$.



Für $\phi = 1^\circ$ und $\phi = 1,25^\circ$ tritt die Fokussierung bei $\theta = 0^\circ$ nicht mehr auf. Statt dessen erhält man bei $\theta = 0^\circ$ ein Maximum und neue Minima bei $\theta = \theta_{(112)} = 0,7^\circ$. Diese Minima sind verbunden mit Maxima in der Reflexion. Also liegt hier eine neue Fokussierung vor, während die Teilchen für $\theta = 0^\circ$ ungehindert in die Oberfläche dringen. Ein Effekt planarer Gitterführung für $\theta = \theta_{(112)}$ scheidet aus, da $\psi_{\min, (112)} = 5,1^\circ$. Abbildung 4.2 zeigt, daß in der Projektion längs (112) die Kette B genau in der Mitte der Ketten A verläuft. Die Ketten A der obersten Lage fokussieren auf die Kette B in der dritten Atomlage unter der Oberfläche. Für $\phi = 0,75^\circ$ liegt ein Übergang vor, wobei die Reflexionsausbeute noch durch die Fokussierung bei $\theta = 0^\circ$ bestimmt ist, wogegen sich in der SEE schon die neue Ionenflußdichteverteilung ankündigt. Die SEE kann also sehr empfindlich auf solche Flußdichteverlagerungen reagieren.

Für $\phi = 1,75^\circ$, $\phi = 2^\circ$ (Abbn.6.27e,f) und $\phi = 2,5^\circ$ (Abb.7.17) ist entlang (001) planare Gitterführung ins Volumen möglich, da $\psi_{\min, (001)} = 1,5^\circ$. Infolgedessen erscheint hier ein neues Minimum, das wie bei der $[1\bar{1}2]$ -Richtung (Abschnitt 6.2) durch den planaren Effekt, nicht durch Fokussierung bedingt ist.

Für $\phi < \phi_{sp} = 1,2^\circ$ wird das Einsetzen einer erhöhten SEE durch θ_{ap} beschrieben (Abschnitt 6.1). In diesem Bereich ist für $\phi_1 < \phi_2$ auch $\hat{E}_\perp(\phi_1) = E \cdot \phi_1^2 < E \cdot \phi_2^2 = \hat{E}_\perp(\phi_2)$ und wegen $U_p(z_{\min}) = \hat{E}_\perp$ gilt $z_{\min}(\phi_1) > z_{\min}(\phi_2)$ (Bezeichnungen aus (4.7) und (4.8)). Daraus folgt nach (4.8) $\theta_{ap}(\phi_1) < \theta_{ap}(\phi_2)$. Dies bestätigt sich für $\phi = 0,5^\circ$ (Abb.6.27a) und $\phi = 0,75^\circ$ (Abb.6.27b). Dementsprechend ist auch die volle Halbwertsbreite bei $\phi = 0,5^\circ$ mit $2,8^\circ$ noch geringer als die bei $\phi = 0,75^\circ$ mit $3,2^\circ$. Es zeigt sich hierin nochmals die Bedeutung von θ_{ap} für die Beschreibung der Breite eines SEE-Profiles für $\phi < \phi_{sp}$. Denn $\theta_c = (\psi_c^2 - \phi^2)^{1/2}$ sinkt mit steigendem ϕ bei gleichbleibendem ψ_c .

Die Höhe des Maximums der relativen SEE-Ausbeute ist bei $H^+(100\text{keV})$, $\phi=0,5^\circ$ größer als bei $\text{He}^+(200\text{keV})$, $\phi=1^\circ$ (Abb.6.1a). Der Minimalabstand $z_{\min}$ von Projekttilbahn und Oberfläche bei planarer Oberflächengitterführung ist für das Potential U_p aus

(4.7) bei fester Oberflächengeometrie wegen $U_p(z_{\min}) = E \cdot \phi^2$ durch $(E \cdot \phi^2)/Z_1$ bestimmt. Für den angesprochenen Vergleich von H^+ und He^+ folgt $z_{\min}(He^+, 200keV, \phi=1^\circ) < z_{\min}(H^+, 100keV, \phi=0,5^\circ)$. Mit größerem $z_{\min}$ geht aber erstens der Einfluß der Oberflächenrauigkeit zurück (Abb.6.28) und das Projektil taucht zweitens weniger tief in den Elektronendichteausläufer ein. So findet man aufgrund eines niedrigeren SEE-Randomwerts ein höheres relatives Maximum und eine klarere Ausprägung des Fokussierungsminimums, wie in Abschnitt 6.1.3 anhand der Computersimulationen gezeigt.

Für $\phi = 1,75^\circ$ und $\phi = 2^\circ$, also $\phi > \phi_{sp} = 1,2^\circ$, kann die planare Oberflächengitterführung, also auch Θ_{ap} , keine Rolle mehr spielen. Deshalb wird die Breite des SEE-Profiles jetzt, im Gegensatz zum Fall $\phi < \phi_{sp}$, doch durch $2\theta_c$ charakterisiert (Abbn.6.27e,f, vgl.auch Abb.6.24).

Für die Einschußwinkel $0,5^\circ < \phi < 5^\circ$ wurde die SEE-Ausbeute γ bei festgehaltenem Θ untersucht. Abbildung 6.29a zeigt die Ergebnisse für $He^+(200keV)$ bei Einschuß in Randomrichtung und entlang $[1\bar{1}0]$. Die entsprechende Computersimulation (Abb.6.29b) ist bezüglich der Absolutwerte dem Experiment bei $\phi = 2,5^\circ$ angepaßt, da das Programm nur relative Targetstromwerte liefert (Abschnitt 5.5). In Abbildung 6.30 sind die Meßwerte für Protonen unterschiedlicher Energie zusammengestellt.

Bei Randomeinschuß ist der Rückgang der SEE-Ausbeute für $\phi < 1,5^\circ$ auffällig. Die dargestellten Werte für $\phi < 1^\circ$ sind dabei bereits daraufhin korrigiert, daß trotz der Strahlblende (Abschnitt 3.3) nicht mehr der ganze durchgelassene Strahl auf die Kristalloberfläche trifft, was bei der Normierung berücksichtigt werden muß (Anhang I). Die großen Fehlerbalken entstehen, da Justierungengenauigkeiten hier empfindlich eingehen.

Die ϕ -Abhängigkeit der ioneninduzierten SEE wird für $90^\circ \geq \phi > 10^\circ$ gut durch ein $(\sin\phi)^{-1}$ -Gesetz beschrieben [02,25,109]. Für kleinere Winkel treten Abweichungen auf [02]. So auch in Abbildung 6.30, wenn man versucht eine $(\sin\phi)^{-1}$ -Kurve anzupassen. Der Grund der $(\sin\phi)^{-1}$ -Abhängigkeit läßt sich an einem einfachen Modell einsehen (Abb.6.31).

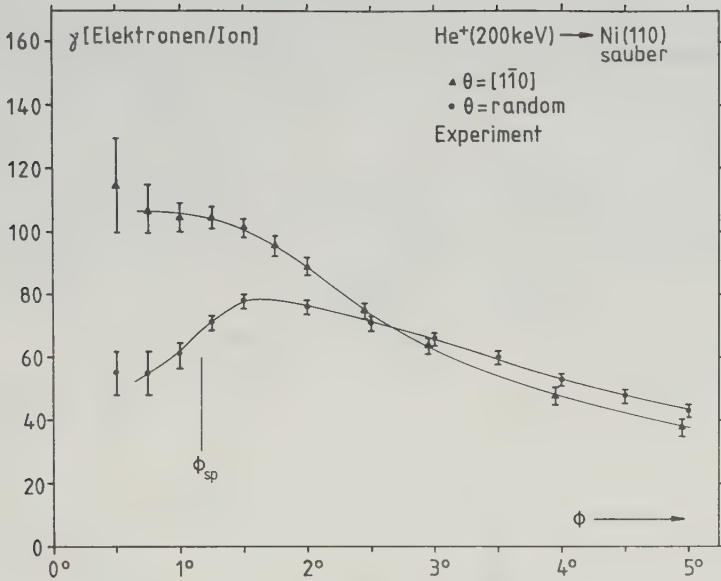


Abb. 6.29a : ϕ -Abhängigkeit der Sekundärelektronenemission.

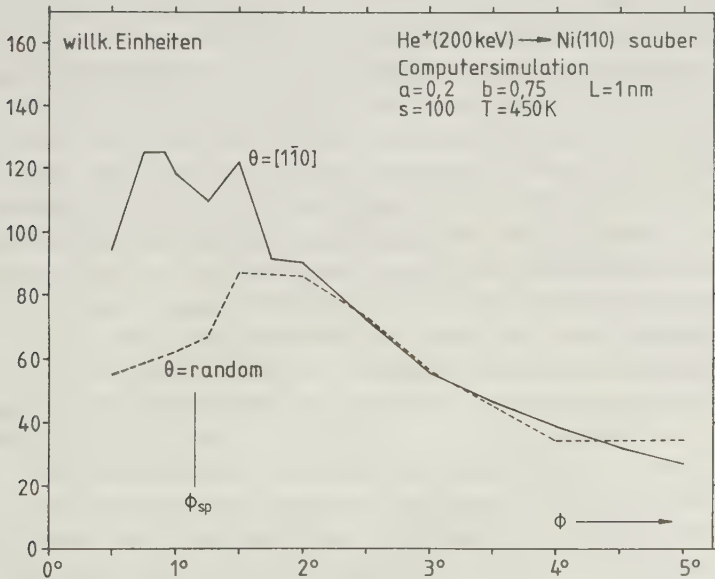


Abb. 6.29b

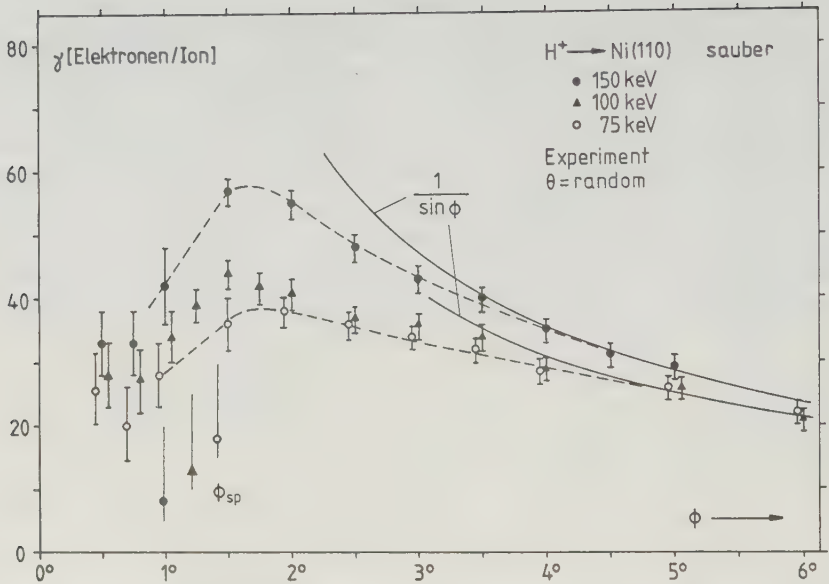
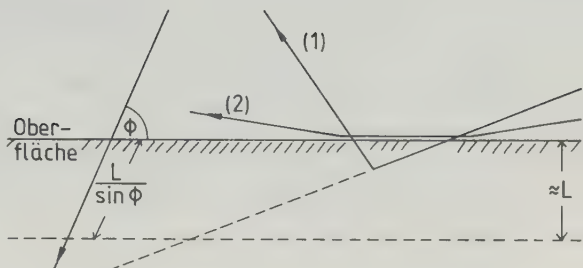


Abb.6.30 : ϕ -Abhängigkeit der Sekundärelektronenemission.

Die SEE ist proportional zur Länge der Wegstrecke des Projektils durch eine Schicht der Dicke $\approx L$ unter der Oberfläche, aus der die produzierten Elektronen noch austreten können. Damit lassen sich auch die Abweichungen für kleinere Winkel verstehen. Von $\phi < 10^\circ$ an steigt, mit sinkendem ϕ , die Wahrscheinlichkeit, daß ein Projektil den Kristall wieder verläßt [12,105]. Die zurückgelegte Strecke in der Oberflächenschicht ist so kürzer als bei der ϕ entsprechenden gradlinigen Bahn (Abb.6.31,(1)). Es werden weniger Elektronen angeregt. Der Effekt verstärkt sich für $\phi < \phi_{sp}$ bei Einsetzen planarer Oberflächengitterführung (Abb.6.31,(2)). Nur der Elektronendichteausläufer und durch Stufen eingefangene Ionen produzieren dann Elektronen. Diese Anteile sinken mit weiter abnehmendem ϕ , wie bei Abbildung 6.27a besprochen. γ wird so $0,2^\circ$ - $0,3^\circ$ über ϕ_{sp} maximal, auch in der Simulation (Abb.6.29b). Bei Einschub parallel zur niederindizierten Richtung $[1\bar{1}0]$ (Abb.6.29a) entfällt der Rückgang für $\phi < \phi_{sp}$ aufgrund der axialen Gitterführung. Für $\phi > 3^\circ$ sinkt hier die Ausbeute unter den Randomwert, wegen des planaren Minimums.

Abb.6.31 : Schematischer Trajektorienverlauf bei verschieden steilem Einschuwinkel ϕ .



Die drastische Abnahme der SEE-Ausbeute für geringere Projektilenergien (Abb.6.30) ergibt sich nicht aus einem unterschiedlichen elektronischen Energieverlust. Dieser ist für $H^+(75\text{keV})$ nur um 6% kleiner als für $H^+(150\text{keV})$ [49]. Zudem müßte dann der Rückgang bei $\phi = 5^\circ$ ebenso stark ausfallen, wie bei $\phi = 2^\circ$. Es handelt sich vielmehr um eine erhöhte Wahrscheinlichkeit der langsameren Protonen, die Oberfläche wieder zu verlassen.

Bei den in 6.32 abgebildeten Messungen wurde ϕ und E so variiert, daß jeweils $\hat{E}_\perp = E \cdot \phi^2 \approx \text{const.}$ ($\hat{E}_\perp(150\text{keV}; 1^\circ) = 45,6 \text{ eV}$; $\hat{E}_\perp(100\text{keV}; 1,25^\circ) = 47,6 \text{ eV}$; $\hat{E}_\perp(75\text{keV}; 1,5^\circ) = 51,4 \text{ eV}$).

Verwendet man zur Charakterisierung der Kurvenbreite den Winkel θ_{ap} aus (4.8), obwohl bereits $\phi \approx \phi_{\text{sp}}$, erwartet man ein Verhältnis $\theta_{\text{ap}}(150\text{keV}) : \theta_{\text{ap}}(100\text{keV}) : \theta_{\text{ap}}(75\text{keV}) = 1 : \sqrt{150/100} : \sqrt{150/75} = 1 : 1,2 : 1,4$, da für gleiches $\hat{E}_\perp$ auch z_{min} gleich ist. Die relative Höhe der SEE-Maxima nimmt mit kleinerer Einschuwenergie E zu. Der Grund ist im Rückgang der Randomwerte der SEE zu suchen (Tabelle 6.5).

Die Fokussierungsminima der SEE bzw. die Maxima der Reflexionsausbeute wandern mit steigendem ϕ mit dem entsprechenden $\theta_{(112)}$ zu größeren θ . Sie werden mit steigendem ϕ bei geringerer Energie deutlicher, da die Reflexion bei größerem ϕ durch Oberflächenstufen weniger behindert wird [11].

Abb.6.32 : Die eingetragenen Winkel θ_{ap} sind gerade im erwarteten Verhältnis 1:1,2:1,4 gewählt (siehe Text) und treffen damit jeweils gut die Punkte, wo die SEE ansteigt.

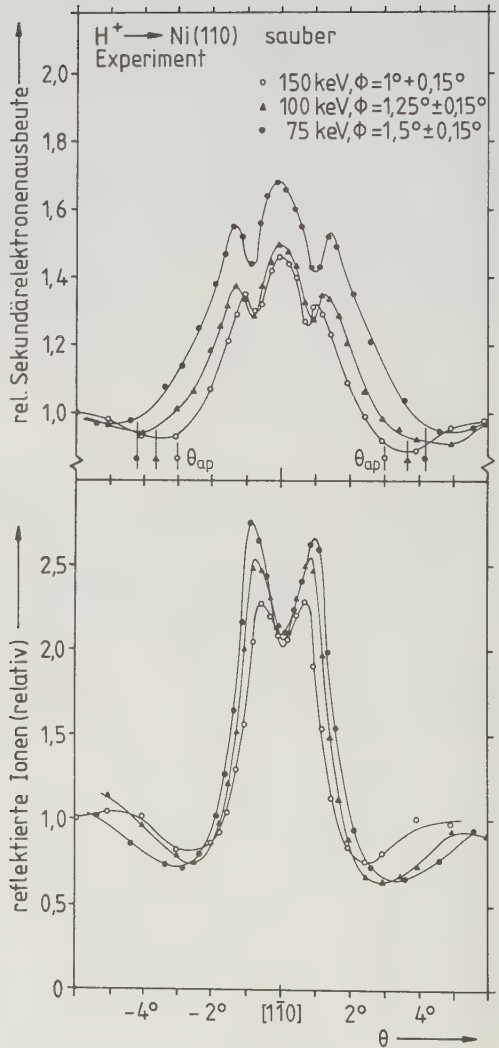


Tabelle 6.5

E [keV]	ϕ	$I_{t,ran}/I_0$ Elek./Ion	spiegel- refl. Ionen
150	1°	42 ± 6	$14 \pm 2\%$
100	$1,25^\circ$	39 ± 1	$12 \pm 1\%$
75	$1,5^\circ$	36 ± 2	$10 \pm 2\%$

Der Vorteil des Sägezahnmodells ist, daß zu seiner Ausbildung ein wesentlich geringerer Ni-Transport nötig ist als beim Missing-Row-Modell.

Mit dieser Festlegung auf zwei alternative Modelle ist das System gut geeignet, sowohl die Veränderungen von SEE-Profilen bei Bedeckung und Rekonstruktion zu klären als auch die damit gegebenen Möglichkeiten zur Struktur- und Positionsbestimmung zu prüfen. Das geschieht durch Vergleich von Simulationsrechnungen in beiden Modellen untereinander und mit dem Experiment.

Die Abbildung 7.2 zeigt das Anwachsen des O(KLL)-Auger-Peaks mit der O₂-Fluenz n_s [120] unter identischen Bedingungen wie bei Bedeckung vor einem Ionenstreuexperiment. Obwohl keine echte Sättigung θ_{sat} erreicht wird und auch für n_s > 5 Ex ein schwacher Anstieg vorliegt [114,121], läßt sich die anfängliche Oxidation doch als Langmuir-Prozeß beschreiben [22,115] :

$$(7.1) \quad \theta_{\text{ox}}/\theta_{\text{sat}} = 1 - \exp(-(H \cdot 2n_s)/(\theta_{\text{sat}} n_A)) ,$$

H : Haftkoeffizient, hier H = 1 ,
 θ_{ox} : Bedeckung in Monolagen(ML) ,
 θ_{sat} : Sättigungsbedeckung in Monolagen(ML) ,
n_s : O₂-Fluenz (Dosis) [120] ,
2n_s : O-Fluenz nach Dissoziation von O₂ ,
n_A : Flächendichte der Kristallatome an der Oberfläche, bei Ni(110) : n_A = 11,3 · 10¹⁴ cm⁻² .

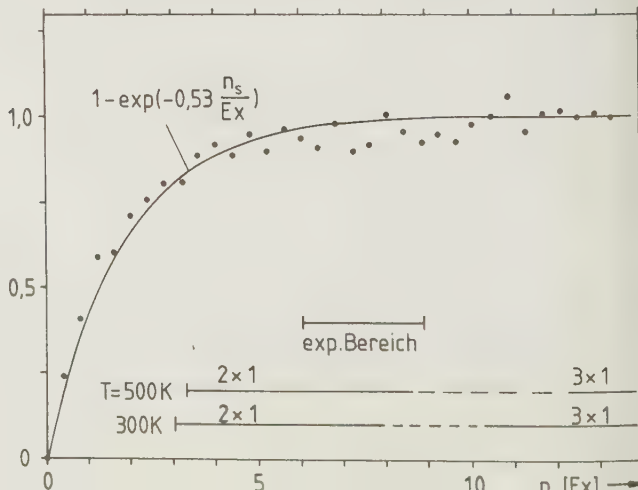


Abb.7.2 : Anwachsen des O-Auger-Signals bei Bedeckung der Ni(110)-Oberfläche.

Die Meßwerte werden für $\theta_{\text{sat}} = 1/3 \text{ ML}$ gut durch die entsprechende Kurve approximiert ($2H/(\theta_{\text{sat}} n_A) = 0,53 \cdot 10^{-14} \text{ cm}^2 = 0,53/\text{Ex}$), passend zu den Bedeckungswerten anderer Autoren bei der (2×1) -Überstruktur. Eingezeichnet ist außerdem der bei den Ionenstreuexperimenten zur Bedeckung der Ni-Oberfläche verwendete O_2 -Fluenzbereich sowie die Bereiche, in denen die verschiedenen LEED-Muster zu sehen sind [20]. Die Temperatur $T = 450 \text{ K}$ des Kristalls während der Bedeckung, aufgrund des vorangegangenen Temperns, spielt hingegen keine Rolle [115,116]. Die (2×1) -Struktur prägt sich sogar deutlicher aus [122].

Bei $\text{Ni}(001)c2 \times 2\text{-O}$ sitzt der Sauerstoff in der 4-fach symmetrischen Muldenposition 90 pm über der unrekonstruierten Oberfläche [123,124,125] (Abstand umstritten [126]). Die Bedeckung ist unkritisch, da die $c2 \times 2$ -Struktur über einen im Vergleich zu $\text{Ni}(110)2 \times 1\text{-O}$ weiten Fluenzbereich erhalten bleibt [127,128].

7.2. Einfluß von Bedeckung und Rekonstruktion auf die SEE; Möglichkeiten zur Struktur- und Positionsbestimmung

Bei der Adsorption von Sauerstoff an einer vorher sauberen Oberfläche können an den SEE-Ausbeuteprofilen folgende Arten von Veränderungen festgestellt werden :

- Verringerung der Breite des Maximums (Abbn.7.3a,7.5,7.6,7.14),
- Verringerung der Höhe des Maximums (Abbn.7.3a,7.5,7.12,7.14a),
- Verschwinden oder Veränderung von Fokussierungsminima (Abbn.7.3a,7.5,7.16,7.17),
- Anstieg des Randomwerts (Abbn.7.3a,7.5,7.6,7.12,7.13,7.14a).

Aufgrund der letztgenannten Möglichkeit sind alle SEE- und Reflexionsprofile auf den Randomwert der sauberen Oberfläche normiert, wie er vor der Bedeckung zum Vergleich gemessen wurde. Zusätzlich ist eine Targetstrommessung von Graser [21] an einer sauberen und einer mit $1/3$ Monolage Sauerstoff bedeckten $60/40 \text{ NiFe}(110)$ -Oberfläche entlang $[1\bar{1}2]$ aufgenommen (Abb.7.12). Die Struktur dieser Oberfläche entspricht sauber der von $\text{Ni}(110)$, bei Sauerstoffbedeckung tritt keine Rekonstruktion auf, jedoch führt der Sauerstoff in der kurzen Brückenposition zu

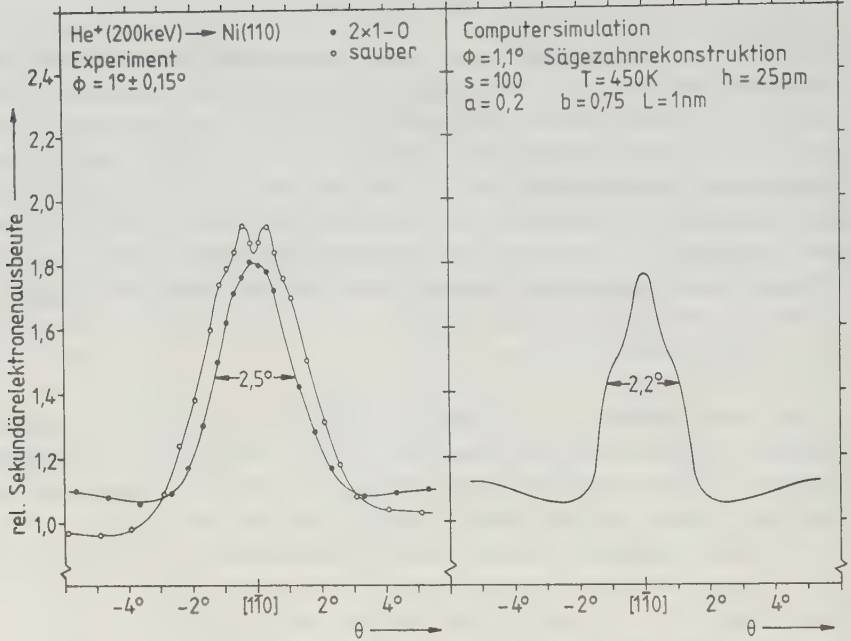


Abb. 7.3a

Abb. 7.3b

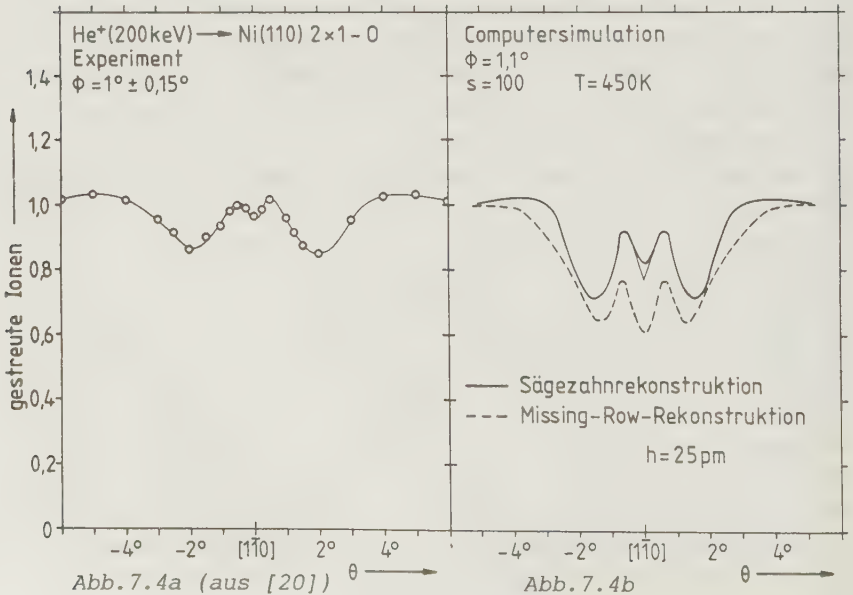


Abb. 7.4a (aus [20])

Abb. 7.4b

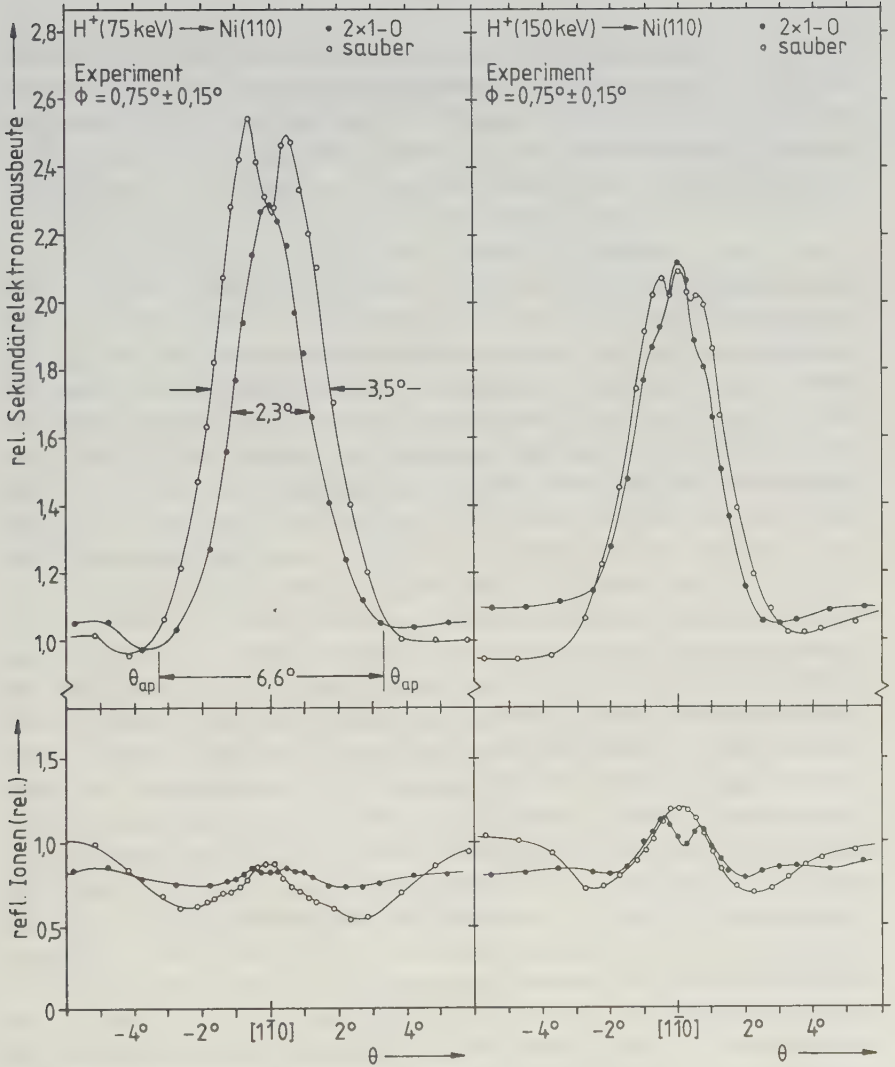


Abb. 7.5

Abb. 7.6

Tabelle 7.1

E [keV]	ϕ	$I_{t,ran}/I_0$ Elek./Ion	spiegel- refl. Ionen
150	$0,75^\circ$	33 ± 4	$22 \pm 2\%$
75	$0,75^\circ$	20 ± 3	$24 \pm 3\%$

Werte für die
saubere Ober-
fläche

einer Verflachung des gefundenen Minimums in der Streuausbeute [21]. Diese Messung ergänzt die durchgeführten Experimente und kann nach den hier entwickelten Konzepten auch interpretiert werden. Auswirkungen einer durch die Bedeckung veränderten Austrittsarbeit ϕ sind in Abschnitt 7.3 diskutiert.

An den unrekonstruierten Oberflächen Ni(001)c2x2-O und NiFe(110)3x1-O (Abbn.7.12 und 7.13a,b) tritt keine Änderung der Kurvenbreite auf. Diese ist typisch für Rekonstruktionen. Zur Beschreibung der Breite eines SEE-Profiles kommt für $\Phi < \Phi_{sp}$ dem Winkel Θ_{ap} , bei dem die planare Oberflächengitterführung aufhört, große Bedeutung zu, während die Halbwertsbreite von Elektronenstruktur und Reflexion beeinflusst wird. Ändert sich bei Rekonstruktion der Oberfläche $d_{ap}/d_{[hkl]}$ aus (4.8), so ändert sich Θ_{ap} und damit die Breite des Profils. Ohne Rekonstruktion ist dies nicht der Fall. Denn die leichten Sauerstoffatome ($Z = 8$) können gegenüber den schweren Ni-Atomen ($Z = 28$) für Ionenstreuung und Gitterführung zunächst vernachlässigt werden. Allerdings ändert sich bei einer Rekonstruktion mit $d_{ap}/d_{[hkl]}$ auch $A(uvw)$, Φ_{sp} und U_p aus (4.4) und (4.7), folglich, bei unverändertem E und Φ , auch z_{min} gemäß $U_p(z_{min}) = E \cdot \Phi^2$. Vergleicht man daher Ausbeutekurven bei gleichem E und Φ , wobei $\Phi < \Phi_{sp,sauber}$, aber $\Phi > \Phi_{sp,rekon}$, ist anhand von (4.8) keine quantitative Aussage mehr möglich und man ist auf Computersimulationen angewiesen. Selbst für $\Phi < \Phi_{sp,sauber}$ und $\Phi < \Phi_{sp,rekon}$ (Abb.7.5) ist ein quantitativer analytischer Vergleich der verschiedenen Θ_{ap} bei sauberer und rekonstruierter Oberfläche mittels (4.8) problematisch, wegen des verschiedenen z_{min} , das experimentell nicht zugänglich ist.

Am günstigsten verändert man die Einschußenergie E_2 und den Einschußwinkel Φ_2 beim Experiment mit bedeckter und rekonstruierter Oberfläche so gegenüber den Werten E_1 und Φ_1 bei sauberer, unrekonstruierter Oberfläche, daß man für ein zu prüfendes Rekonstruktionsmodell gleiches z_{min} erwartet (gemäß $U_p(z_{min}) = E \cdot \Phi^2$) :

$$(7.2) \quad \frac{E_1 \Phi_1^2}{E_2 \Phi_2^2} = \frac{U_{p,sauber}(z_{min})}{U_{p,rekon}(z_{min})} = \frac{A(uvw)_{sauber}}{A(uvw)_{rekon}} .$$

Stimmen dann Experiment und Theorie (4.8) überein :

$$(7.3) \quad \left(\frac{\Theta_{ap, sauber}}{\Theta_{ap, rekon}} \right)_{exp} = \left(\frac{\Theta_{ap, sauber}}{\Theta_{ap, rekon}} \right)_{the} = \left(\frac{d_{ap, sauber}}{E_1 d_{sauber}} / \frac{d_{ap, rekon}}{E_2 d_{rekon}} \right)^{1/2}$$

so kann das als Bestätigung des vorgeschlagenen Rekonstruktionsmodells gelten. Es ist dabei zu beachten, daß

$$(7.4) \quad \Phi_1 < \Phi_{sp, sauber} \quad \text{und} \quad \Phi_2 < \Phi_{sp, rekon} \quad .$$

Für die Ni(110)-Oberfläche ist sowohl für das Missing-Row- als auch für das Sägezahnmodell $A(110)_{sauber}/A(110)_{rekon} = 2$ und längs $[1\bar{1}0]$ $d_{ap, sauber} = d_{ap, rekon}$ und $d_{rekon} = 2 \cdot d_{sauber}$.

(7.2) und (7.4) sind unter den hier mit Protonen entlang $[1\bar{1}0]$ durchgeführten Experimenten am besten erfüllt für $E_1 = 100$ keV, $\Phi_1 = 1^\circ$ und $E_2 = 75$ keV, $\Phi_2 = 0,75^\circ$: $(E_1 \Phi_1^2)/(E_2 \Phi_2^2) = 2,37$.

Für $\Theta_{ap, sauber}/\Theta_{ap, rekon}$ erwartet man damit nach (7.3) :

$$(\Theta_{ap, sauber} / \Theta_{ap, rekon}) = \sqrt{2E_2/E_1} = 1,22 \quad .$$

Die in Abbildung 7.5 und 6.27c eingezeichneten Θ_{ap} stehen gerade in diesem Verhältnis und treffen ausgezeichnet auf die Punkte, bei denen der Targetstrom ansteigt. Dies bestätigt eine Rekonstruktion, bei der die Anzahl der Oberflächenatome $A(110)$ um die Hälfte zurückgeht. Weitergehende Aussagen, etwa die Unterscheidung von Sägezahn- und Missing-Row-Modell, erfordern die Beachtung aller Merkmale einer Kurve, d.h. Computersimulationen.

Festzuhalten bleibt, daß die Veränderung des Anstiegspunktes der SEE bei Oberflächenrekonstruktion ein Effekt des veränderten Ionenstreuverhaltens beim Übergang von planarer zu axialer Oberflächengitterführung ist. Die durch Sauerstoff und Rekonstruktion veränderte elektronische Struktur der Oberfläche spielt dafür eine untergeordnete Rolle.

Aufgrund dieser Tatsache wird in den Simulationen zur bedeckten Oberfläche der Modellwirkungsquerschnitt (5.32) für die Elektronenanregung zunächst unverändert von der sauberen Oberfläche übernommen. Die neue Geometrie der rekonstruierten Substratoberfläche ist berücksichtigt, der adsorbierte Sauerstoff streut mit und beeinflusst so geringfügig die Ionenflußdichteverteilung. Sein Beitrag zur SEE wird aber vorerst vernachlässigt.

Trotz dieser Vereinfachungen können wesentliche Züge der SEE-Profile wiedergegeben werden. Die Auswirkung von Modifikationen der Modellannahmen ist in Abbildung 7.8 zusammengefaßt.

Die Rechnung Abbildung 7.3b für $\text{He}^+(200\text{keV}) \rightarrow \text{Ni}(110)2 \times 1-0$ für eine nach dem Sägezahnmodell rekonstruierte Oberfläche und Einschub parallel zu $[1\bar{1}0]$ zeigt eine verringerte Halbwertsbreite, ein Verschwinden des Fokussierungsminimums bei $\theta = 0^\circ$ und einen Rückgang der Höhe des relativen SEE-Maximums, wie es auch im Experiment gefunden wird. Als Sauerstoffposition wird nach Schuster [39] die lange Brückenposition 25 pm über der obersten Ni-[001]-Kette angesetzt. Die Entstehungstiefe $|z|$ eines Elektrons in (5.10) und (5.11) wird von der obersten rekonstruierten Ni-Lage ab gerechnet. In der Rechnung sind $\phi = 1,1^\circ$ und alle übrigen Parameterwerte wie bei der sauberen, unrekonstruierten Oberfläche beibehalten. Der Anstieg des Randomwerts der SEE-Ausbeute tritt auch in der Simulation auf, jedoch stärker als im Experiment ($\approx 30\%$). Die Diskrepanz läßt wieder die empfindliche Reaktion der Rechnung auf Veränderungen der Oberflächenrauigkeit erkennen, die durch die Rekonstruktion in atomaren Maßstab zugenommen hat. Für die Abbildung 7.3b sind die Rechenergebnisse so normiert, daß der Randomwert mit dem experimentellen relativen Randomwert übereinstimmt.

Die gerechnete Kurve ist schmaler, als die gemessene, und weist bei $\theta = 0,75^\circ$ eine Strukturierung auf, die im Experiment fehlt. Dazu ist zu bemerken, daß in bezüglich der Gitterführung eng benachbarten Situationen auch experimentell ähnliche Verschmälerungen (Abb.7.5) und Strukturen (Abb.7.6) zu beobachten sind. Ferner ist die Oberfläche in der Simulation mit 0,5 ML O bedeckt, im Experiment bei der 2×1 -Überstruktur dagegen nur mit ca. 0,3 ML (Abschnitt 7.1). Andererseits überlappen die Fluenzbereiche, wo man (2×1) - und bereits (3×1) -Überstruktur findet [20,114]. Schließlich zeigen die Rechnungen mit modifiziertem Anregungsquerschnitt (Abb.7.8), daß die Ausprägung der Strukturierung bei $\theta = 0,75^\circ$ wie auch die Halbwertsbreite vom Modellwirkungsquerschnitt abhängt, womit bei dem verwendeten einfachen Modell keine völlige Übereinstimmung erwartet werden darf.

Legt man der Simulation eine nach dem Missing-Row-Modell rekonstruierte Oberfläche zugrunde, erhält man allerdings eine deutlich noch schmalere Kurve als bei der Rechnung zum Sägezahnmodell (Abb.7.7). Dies gilt auch für verschiedene angenommene Höhen h des Sauerstoffs in langer Brückenposition über der obersten Ni-[001]-Kette, für $\phi = 1,1^\circ$ und $\phi = 1,0^\circ$ und für verschieden modifizierte Elektronendichteausläufer (Abb.7.9). Damit liegt die Sägezahnrekonstruktion mit ihren Ergebnissen näher am Experiment, als die Missing-Row-Rekonstruktion. Die SEE favorisiert somit das Sägezahnmodell.

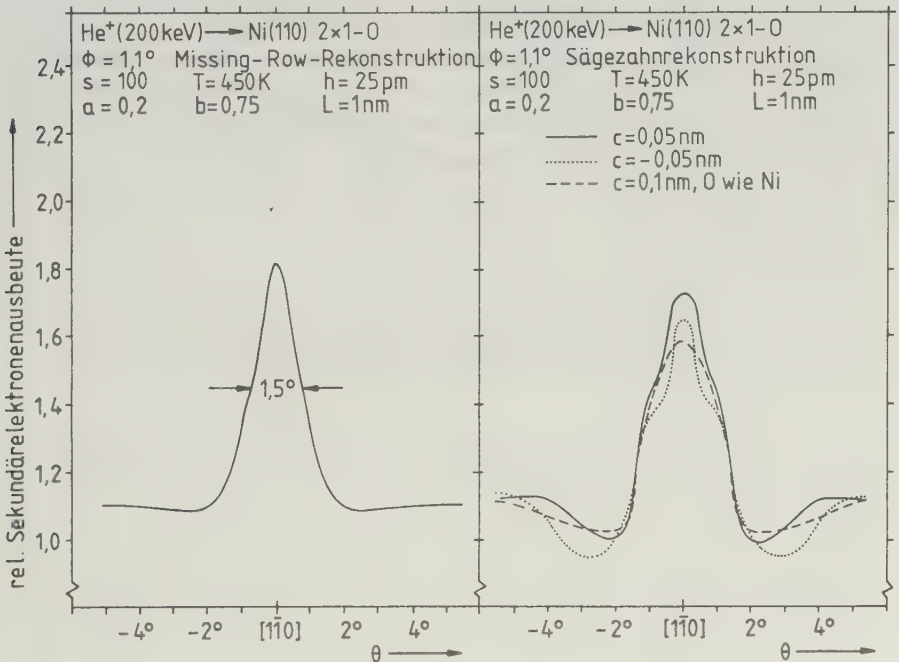


Abb. 7.7

Abb. 7.8

Für die gestrichelte Kurve in Abb.7.8 (O wie Ni) wurde angenommen, daß auch die Sauerstoffatome zur Elektronenproduktion beitragen, und zwar probeweise mit gleicher Stoßparameterabhängigkeit wie ein Ni-Atom, aber dem $(-dE/ds)_e$ von Sauerstoff.

Die Bestimmung nicht der Substrat-Rekonstruktion, sondern der Sauerstoffposition direkt aus einer SEE-Messung ist schwierig, da man kein sauerstoffspezifisches Signal hat, wie etwa bei der Ioneninduzierten AES [39]. Da die Sauerstoffposition die Ionenflußdichteverteilung, wenn auch in geringem Ausmaß, mitbestimmt, kann allenfalls durch Simulationsrechnungen eine Aussage gewonnen werden. In diesem Sinne wurde in den Rechnungen aus Abbildung 7.9, bei vorgegebener langer Brückenposition, die Höhe h des Sauerstoffs über der obersten rekonstruierten [001]-Kette variiert. Die breiteste, damit am besten zum Experiment passende Kurve findet man für $h = 25$ pm. Obwohl dies gerade der Wert ist, den auch Schuster [39] für h ermittelt, darf die Schärfe, mit der dieses Maximum auftritt, nicht überbewertet werden. Denn zumindest aufgrund des vereinfachenden Modellwirkungsquerschnitts der Elektronenanregung ist ein Fehler der Halbwertsbreiten von $\pm 0,1^\circ$ angemessen. Bemerkenswert ist, daß auch bei Schuster, der Ausbeutekurven Ioneninduzierter AES mit entsprechenden Simulationen vergleicht, der angegebene h -Wert aus einer extremalen Simulationskurve folgt, die dann allerdings das gesamte Profil richtig beschreibt. Ein Abstand $h = 25$ pm führt zu einer Ni-O-Bindungslänge von 180 pm, was sehr gut mit dem Wert für eine polare Einfachbindung übereinstimmt [129].

Die Tatsache einer geringeren Halbwertsbreite beim Missing-Row- als beim Sägezahnmodell ist verblüffend. Ausgehend vom kritischen Winkel ψ_c (4.3) läßt sich nämlich argumentieren, daß eine Ausbeutekurve an der rekonstruierten Oberfläche schmaler ist, als an der sauberen, weil sich $d_{[hkl]}$ verdoppelt. Beim Missing-Row-Modell ist dies nur in der obersten Lage so, beim Sägezahnmodell zusätzlich in der zweiten Lage. Man erwartet also hierfür die stärkere Verschmälerung und findet sie z.B. im Fall Ioneninduzierter AES auch [39].

Bei der SEE tritt genau das Gegenteil ein und belegt so ein weiteres Mal, daß ψ_c zur Beschreibung der Profile hier unangemessen ist. Auch eine Betrachtung von Θ_{ap} liefert nicht die gewünschte Erklärung für die unterschiedlichen Halbwertsbreiten, insbesondere nicht für $\text{He}^+(200\text{keV}) \rightarrow \text{Ni}(110)2 \times 1-\text{O}, [1\bar{1}0], \phi = 1^\circ$,

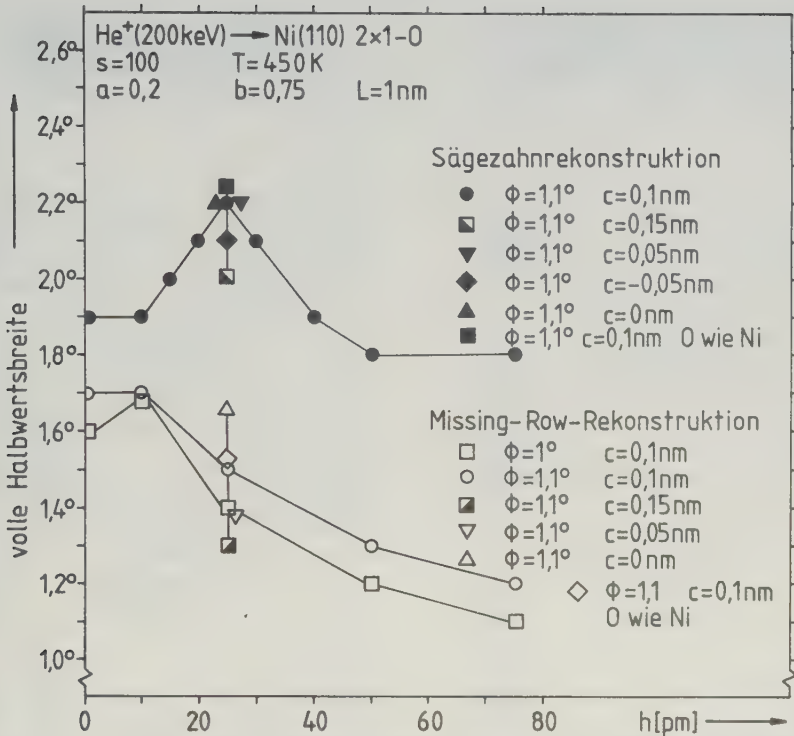


Abb.7.9 : Berechnete Halbwertsbreiten in verschiedenen Modellen. Bezüglich der Rechnungen "O wie Ni" vgl. Bemerkung zu Abb.7.8.

weil hier $\Phi > \Phi_{sp, rekon} = 0,82^\circ$. Man betrachte aber die Ausbeutekurven gestreuter bzw. reflektierter Ionen.

Für He⁺(200keV) → Ni(110)2x1-0, $[\bar{1}\bar{1}0]$ konnte dazu auf eine Messung von Erasmus analog zu der aus Abbildung 6.2 zurückgegriffen werden [20]. Die hierbei sichtbare Aufspaltung des Fokussierungsmaximums bei $\Theta = 0^\circ$ in zwei Maxima bei $\Theta \approx \pm 0,5^\circ$ wurde aber in einer eigenen Messung reflektierter Ionen (Abb.7.6) bestätigt. Das Auftreten von Maxima in der Reflexion in Verbindung mit einem Rückgang der SEE-Ausbeute, wie sie besonders in Abbildung 7.6 deutlich wird, erinnert an die Fokussierungsminima der sauberen Oberfläche. Genauer dazu läßt sich den berechneten Ionenflußdichteverteilungen entnehmen (Abbn.7.10a-j).

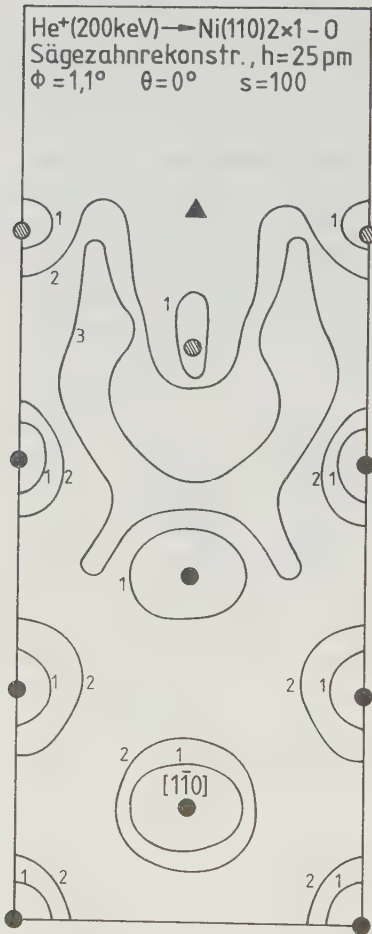


Abb. 7.10a

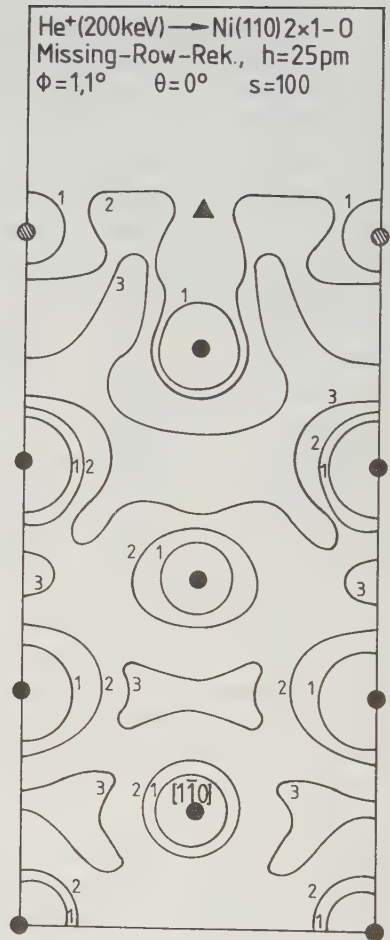


Abb. 7.10b

Abb. 7.10a-j : Ionenflußdichteverteilungen ($T = 450 \text{ K}$).

- Ni-Ketten mit normalem Atomabstand wie im Kristallvolumen .
- ⊗ Rekonstruierte Ni-Ketten mit doppeltem Atomabstand .
- ▲ Sauerstoff-Ketten.

Diese ergeben zunächst für Randeneinschuß ($\theta = 5^\circ$, Abb. 7.10j), daß wegen $\Phi > \Phi_{\text{sp, rekon}}$ an der rekonstruierten Oberfläche tatsächlich keine planare Oberflächengitterführung mehr existiert. Teilchen dringen in die beiden rekonstruierten Lagen ein, was

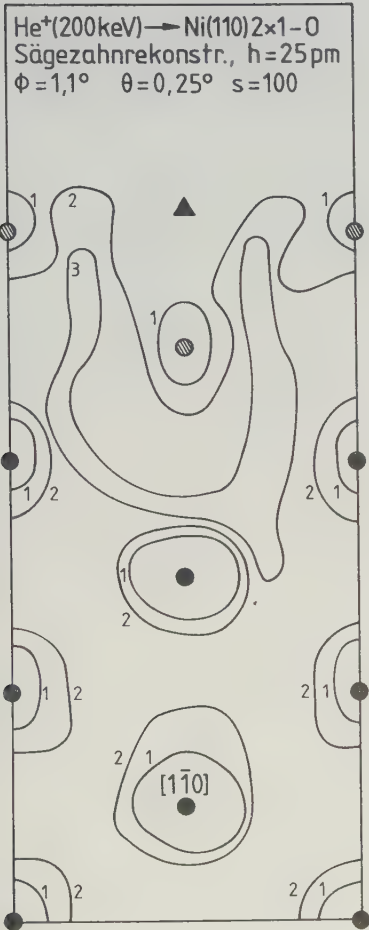


Abb. 7.10c

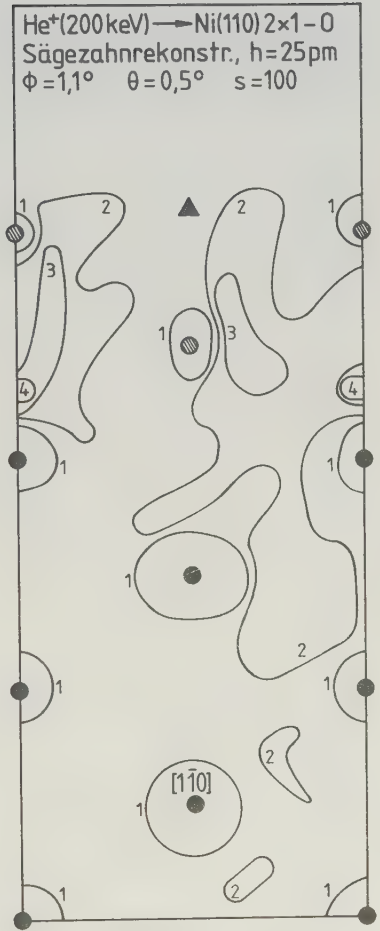


Abb. 7.10d

eine Reduktion der Spiegelreflexion und damit den Anstieg des Randomwertes der SEE zur Folge hat. Bis in die unrekonstruierten Lagen stoßen weniger Projektile vor (Flußdichte 0,5-0,6<1). Die Verhältnisse bei Missing-Row-Rekonstruktion entsprechen den gezeichneten, mit nur einer rekonstruierten Lage.

Für $\theta = 0^\circ$ ist sowohl für das Sägezahnmodell, wie für das Missing-Row-Modell die Fokussierung der sauberen Oberfläche aufgehoben (Abbn. 7.10a,b). Ein Fluß von 2-3 ist jetzt bis in

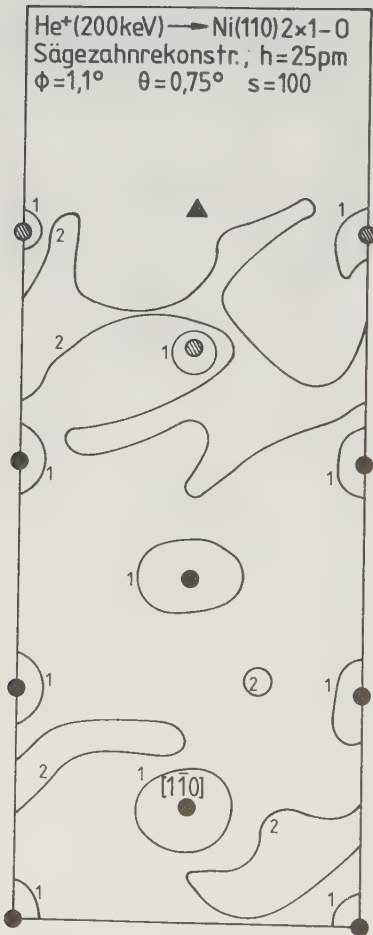


Abb. 7.10e

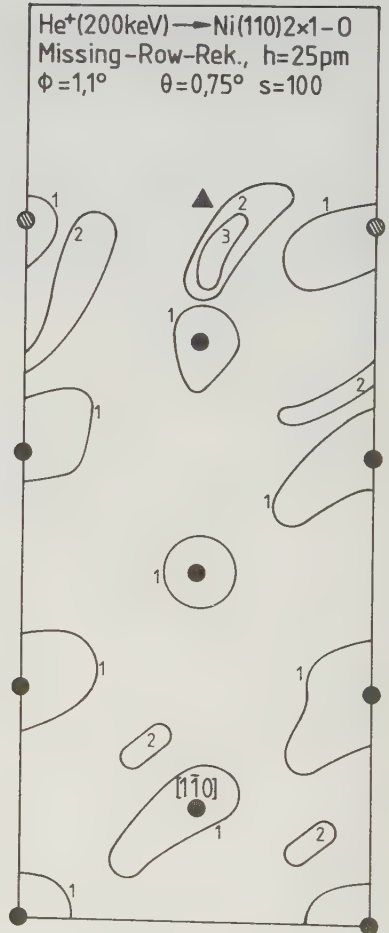


Abb. 7.10.f

tieferen Lagen hin anzutreffen und führt zum SEE-Ausbeutemaximum bei $\theta = 0^\circ$.

Das Verschwinden eines Fokussierungsmimums in einer SEE-Kurve ist also, wie eine Änderung von θ_{ap} , ein unmittelbarer experimenteller Hinweis auf eine Oberflächenrekonstruktion des Substrats mit entsprechender Ionenflußdichteänderung.

Für $\theta = 0,5^\circ$ (Abb. 7.10d) findet man neue Flußdichtemaxima an bzw. über Atomketten der zweiten und dritten Atomlage.

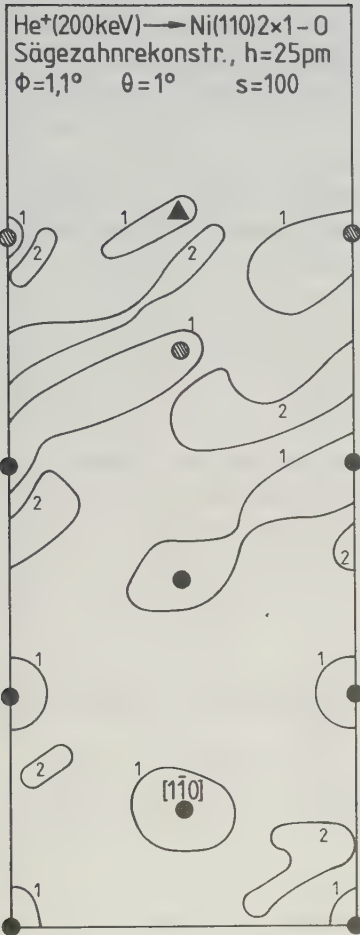


Abb. 7.10g

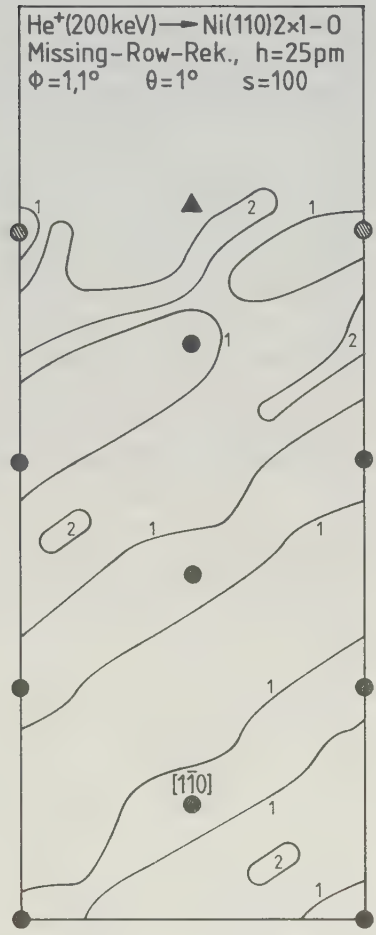


Abb. 7.10h

Die Verhältnisse bleiben hierbei für Missing-Row- und Sägezahnrekonstruktion noch ähnlich, weshalb nur der letztgenannte Fall dargestellt ist. Bei der Missing-Row-Rekonstruktion ist lediglich das Maximum an der Kette in der zweiten Lage (unter dem Sauerstoff) höher (Dichte > 4), da diese Kette dort ja bereits den normalen Atomabstand $d_{[1\bar{1}0]}$ hat, also besser führt, wogegen das Maximum über der Kette in der dritten Lage zurückgeht (Dichte ≈ 3). Beide Male gibt dieser erhöhte Fluß an oberen Atom-

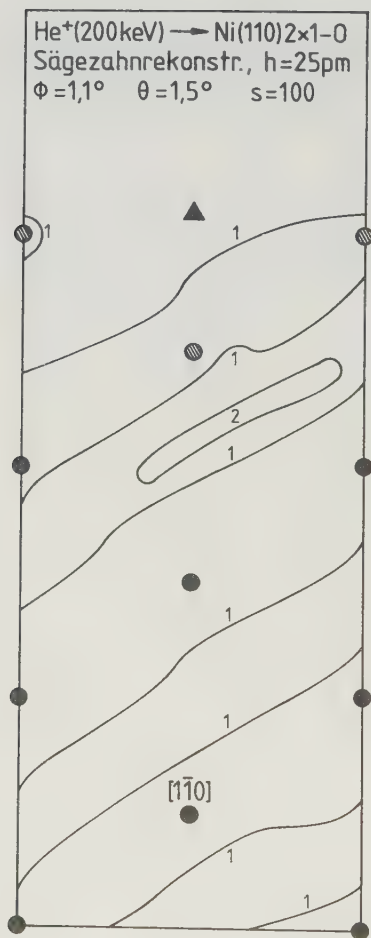


Abb. 7.10i

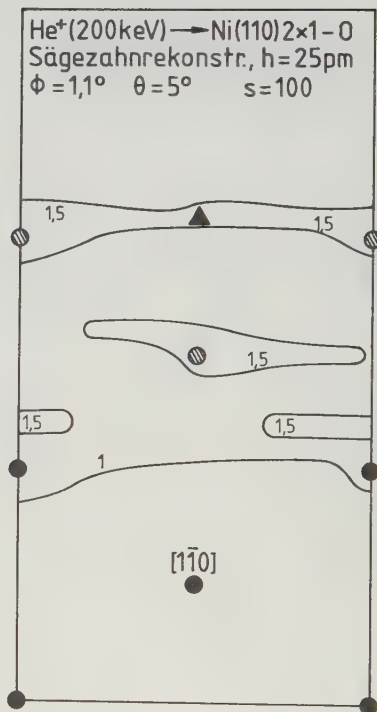


Abb. 7.10j

ketten, wie bei einer Fokussierung an der sauberen Oberfläche, Anlaß zu erhöhter Reflexion, also zu den Ausbeutemaxima gestreuter Ionen bei $\theta = 0,5^\circ$ in den Abbildungen 7.4a und 7.6. Diese werden in beiden Modellen an derselben Stelle erwartet (Abb.7.4b). Aufgrund dieser Reflexion sinkt die SEE-Ausbeute gegenüber ihrem Wert bei $\theta = 0^\circ$ wie auch gegenüber ihrem Wert für $\theta \neq 0^\circ$ an der sauberen Oberfläche.

Ein wirksamer Unterschied zwischen beiden Modellen macht sich erst für $\theta = 0,75^\circ$ und $\theta = 1^\circ$ bemerkbar. Die Kette in der zweiten Atomlage hat bei Missing-Row-Geometrie, wie schon erwähnt, bereits den Atomabstand $d_{[1\bar{1}0]}$ wie im Substrat und führt deshalb stärker als die entsprechende Kette im Sägezahnmodell mit ihrem doppelten Atomabstand. Das Flußdichtemaximum über dieser Kette mit der daraus resultierenden höheren Reflexion bleibt daher im ersten Fall auch noch bei $\theta = 0,75^\circ$ erhalten (Abb.7.10e), während im zweiten Fall die Projektile trotz der Kette weiter ins Volumen vordringen und mehr Elektronen produzieren können (Abb.7.10f).

Bei $\theta = 1^\circ$ wirft die normal besetzte Kette (Missing-Row) einen breiteren Schatten als die dünner besetzte (Sägezahn) und erzeugt damit Streifen verringerter Flußdichte (< 1) bis in tiefe Lagen hinab (Abbn.7.10g,h). Die Entstehungstiefepprofile (Abb.7.11) für $\theta = 0,75^\circ$ und $\theta = 1^\circ$ zeigen die unterschiedliche Elektronenproduktion. Durch sie ist die geringere Halbwertsbreite im Missing-Row-Modell bedingt.

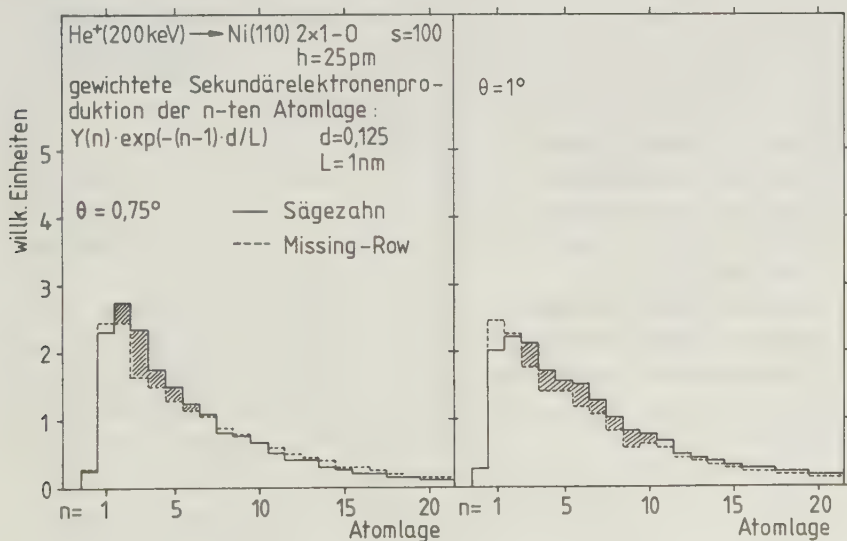


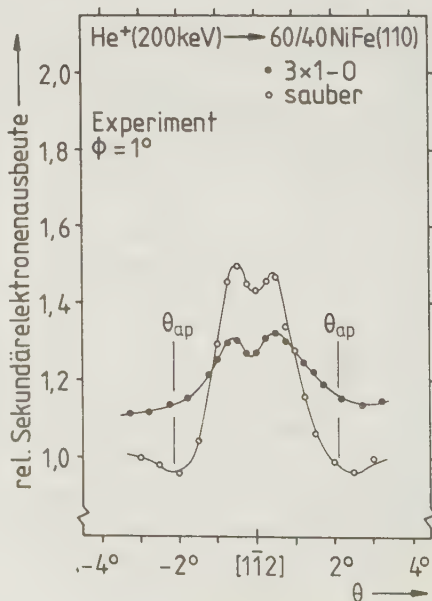
Abb. 7.11

Ferner geht aus Abbildung 7.10e hervor, daß die Ausprägung des Flußdichtemaximums über der mittleren Atomkette auch von der darüberliegenden, obgleich nur schwach führenden Sauerstoffkette mitbeeinflusst wird. Das erklärt die Abhängigkeit der Halbwertsbreite von h (Abb.7.9).

Auch diese Analyse läßt die vorrangige Bedeutung des Ionenflusses zur Beschreibung der wesentlichen Merkmale eines SEE-Profiles erkennen, während elektronische Strukturfragen eher vereinfacht behandelt werden können.

Waren es bisher die rekonstruierten Ni-Substratatome, die die nötige Ionenflußänderung besorgten, zeigt die Messung von Graser [21] (Abb.7.12), daß gegebenenfalls auch der Sauerstoff allein dazu in der Lage ist. Der Rückgang des SEE-Maximums ist dort mit einem klaren Anstieg der Reflexion verbunden, was wieder die ausschlaggebende Bedeutung des Ionenflusses, nicht der elektronischen Veränderungen, für die Elektronenproduktion untermauert.

Abb.7.12 : Aus [21].
Mit dem Rückgang der Sekundärelektronen - emission bei Sauerstoffadsorption findet man dort einen Anstieg der Reflexionsausbeute.



Bei $[1\bar{1}2]$ handelt es sich um keine Semikanalrichtung (Abb.4.2). Planare Gitterführung entlang $(\bar{1}11)$ ist möglich (Abschnitt 6.2). Der Sauerstoff in der kurzen Brückenposition blockiert diese Richtung und bewirkt erhöhte Reflexion. Das relative SEE-Minimum bei $\theta = 0^\circ$ durch Teilchen, die dennoch planar eindringen, bleibt erhalten. Die bei Graser aufgrund der erhöhten Reflektivität durchgeführte Positionsbestimmung der O-Atome ist somit genauso aufgrund der verringerten SEE-Ausbeute möglich.

Am Ende des Abschnitts soll ein Experiment stehen, das explizit den Einfluß elektronischer Veränderungen der Oberfläche bei Bedeckung auf die SEE untersucht, möglichst unabhängig von einer Ionenflußänderung. Deren eher geringe Bedeutung war bislang nur aus Computersimulationen (Abb.7.8) und aus der Tatsache hervorgegangen, daß die wesentlichen Änderungen der SEE schon durch die Ionenflußänderungen allein verständlich waren. Eine Situation, bei der die Sauerstoffadsorption nur geringe Ionenflußänderungen bewirkt, was man an der Reflexionsausbeute sieht, liegt an der Ni(001)-Oberfläche entlang $[110]$ vor (Abbn.7.13a,b). Im Vergleich zu Ni(110) ist der Abstand der oberen Atomlagen größer, der Kettenabstand in der Oberfläche geringer (Abb.4.2). Ketten, auf die fokussiert werden kann, liegen dadurch ungünstig. Deshalb erscheinen Fokussierungsmaxima in der Reflexion erst für steileren Einschub $\phi = 1,5^\circ$ deutlich, und zwar bei $\theta = 0^\circ$ und $\theta = \theta(\bar{1}12)$. Die fokussierungsbedingte Reflexion ist aber zu schwach, um in der SEE bemerkbar zu sein.

Bei Sauerstoffadsorption zu Ni(001)c2x2-O beobachtet man ein Absinken und eine leichte Verflachung der Reflexionsprofile, jedoch keine Änderung wie in den Abbildungen 7.4a und 7.6, die auf eine grundsätzlich andere Ionenflußverteilung schließen ließe. Ein vergleichbarer Rückgang der Spiegelreflexionsausbeute an der unrekonstruierten und der rekonstruierten Oberfläche (Ni(001)c2x2-O, $\phi = 1^\circ$: (10±2)% und Ni(110)2x1-O, $\phi = 0,75^\circ$: (15±2)% für $H^+(150\text{keV})$) ruft beidemale auch einen vergleichbaren Anstieg der Random-SEE-Ausbeute hervor ((9±2)% bzw. (10±2)%).

Denn die Zunahme der SEE wird von Teilchen bewirkt, die nach einem Stoß mit einem Adsorbatatom oder mit einem rekonstruierten Atom nicht mehr reflektiert werden, wie an der sauberen Oberfläche, sondern in den Kristall eindringen und dort beim Durchlaufen einer Schicht der Dicke $\approx L$ Elektronenemission auslösen (Abschnitt 6.3, Abb.6.31). Die Elektronenausbeute am Anfang einer solchen Bahn, die für eine nichtrekonstruierte und eine rekonstruierte Oberfläche durchaus verschieden sein wird, ist nur ein kleiner Teil der Elektronenausbeute längs der gesamten Bahn. Die anfänglichen Unterschiede wirken sich so nicht aus. Damit ist auch der Anstieg des SEE-Randomwerts kein Effekt einer veränderten elektronischen Struktur, sondern der veränderten Spiegelreflexion.

Dies bestätigen auch die Messungen des folgenden Abschnitts bei steileren Einschußwinkeln Φ , wo Bedeckung und Rekonstruktion keine Veränderung der Streuausbeute mehr zur Folge hat. Damit bleibt auch die SEE gleich. Der Anstieg des SEE-Randomwerts zeigt zwar eine Adsorbatbedeckung an, zur Struktur- oder Positionsbestimmung können jedoch nur die SEE-Maxima bei Einschuß entlang der niederindizierten Richtungen herangezogen werden. Diese Maxima erfahren bei Ni(001), [110] nur durch die Anwesenheit des Sauerstoffs keine ähnlich aufschlußreiche Veränderung (Abbn.7.13a,b), wie die Ni(110), [$\bar{1}\bar{1}$ 0]-Maxima bei der dort infolge der Rekonstruktion auftretenden Ionenflußänderung. Obwohl der Sauerstoff bei Ni(001)c2x2-O in den Muldenpositionen direkt über dem [110]-Kanal sitzt, findet zum Beispiel keine deutliche Elektronenmehrproduktion aufgrund zusätzlicher Sauerstoffelektronen statt, die nicht auch, wie im Randomfall, durch verminderte Reflexion erklärt werden könnte.

Charakteristische Änderungen an SEE-Profilen sind nur zu erwarten, wenn mit einer Adsorption klare Ionenflußänderungen eintreten.

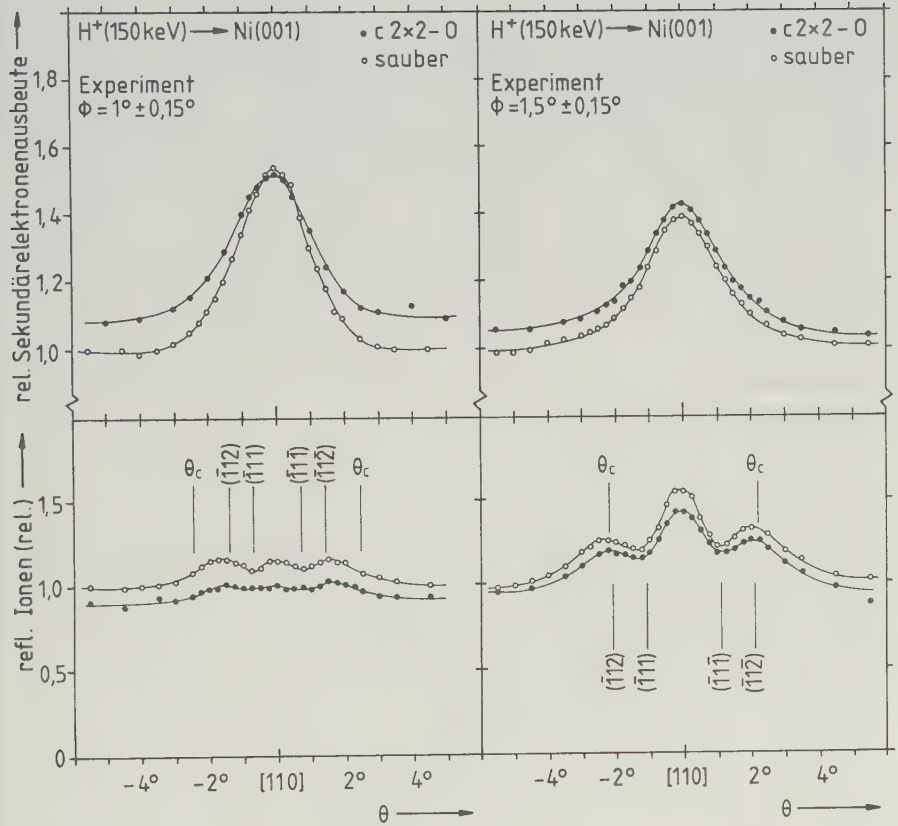


Abb. 7.13a

Abb. 7.13b

Tabelle 7.2

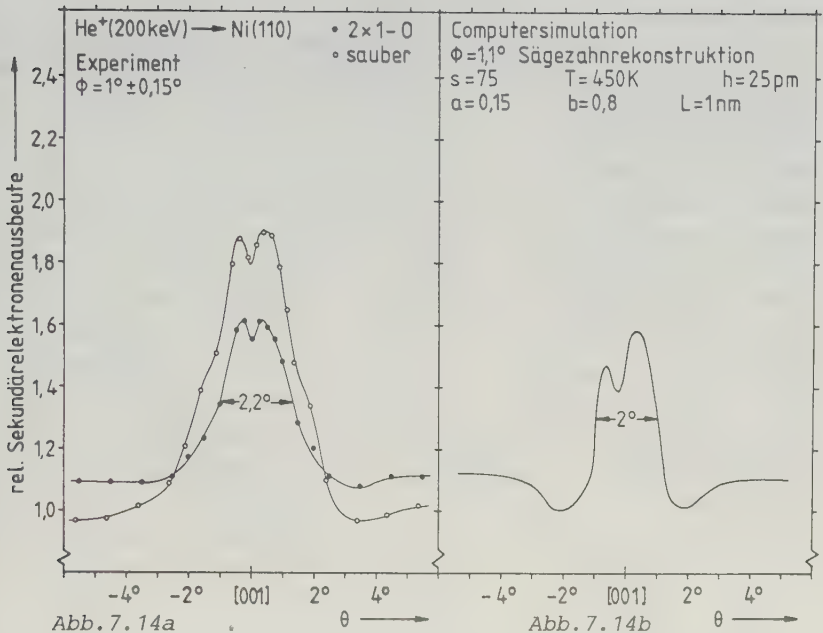
ϕ	$I_{t,ran}/I_0$ Elek./Ion	spiegel- refl. Ionen
1°	41 ± 5	$15 \pm 2\%$
$1,5^\circ$	50 ± 1	$12 \pm 2\%$

Werte für die
saubere Ober-
fläche

7.3. Weitere Profile an Ni(110)2x1-0; planare Gitterführung bei Bedeckung

Das relative SEE-Ausbeuteprofil für $\text{He}^+(200\text{keV}) \rightarrow \text{Ni}(110)2 \times 1-0$ entlang [001] wird gegenüber der Kurve der sauberen, unrekonstruierten Oberfläche drastisch niedriger und schmaler (Abb.7.14a). Der Randomwert der SEE-Ausbeute steigt wie längs $[1\bar{1}0]$ (Abb.7.3a) um $(10 \pm 2)\%$ an, die Struktur bei $\theta = 0^\circ$ bleibt diesmal erhalten, im Gegensatz zu $[1\bar{1}0]$. Die Computersimulation (Abb.7.14b) gibt diese wesentlichen Änderungen richtig wieder. Dabei werden die Parameterwerte wie für die saubere Oberfläche, einschließlich $\phi = 1,1^\circ$, beibehalten. Die berechnete Kurve ist stark asymmetrisch, entsprechend der asymmetrischen Geometrie des Sägezahns in der [001]-Blickrichtung. Die Symmetrie des experimentellen Kurvenverlaufs erklärt sich dadurch, daß die Oberfläche nicht einheitlich rekonstruiert, sondern daß es Bereiche mit Sägezahn "nach rechts" und solche "nach links" gibt. Im Experiment wird über viele solcher unterschiedlicher Bereiche gemittelt [39]. Die Ionenflußdichteverteilung (Abb.7.15) für $\theta = -0,25^\circ$ zeigt, daß das relative Minimum auf die bekannte Art durch Flußdichtemaxima über oberen Atomketten entsteht, die ein weiteres Eindringen der Ionen verhindern und zu baldiger Reflexion führen. Auch hält sich ein großer Teil der Ionen (Flußdichte > 2) entfernt von den Atomen in Gegenden geringer Elektrendichte auf. Dies verursacht die Abnahme des Maximums im Vergleich zur sauberen Oberfläche.

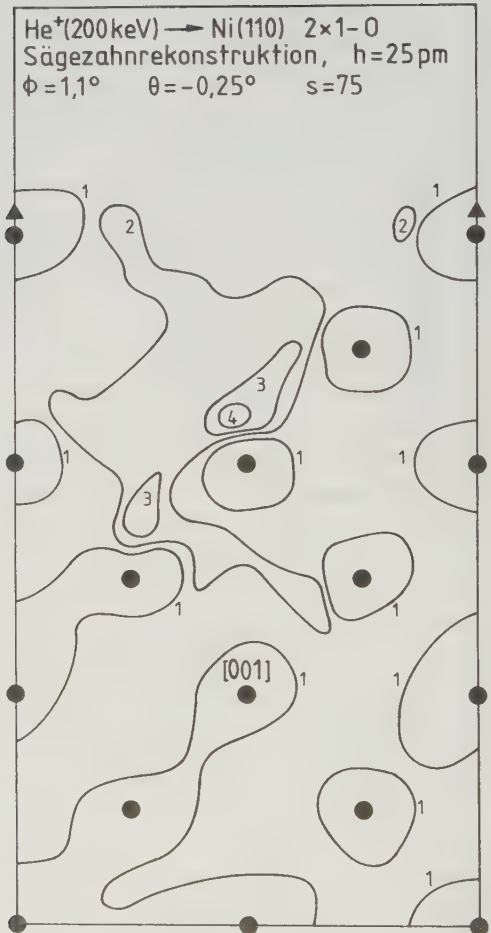
Abbildung 7.16 zeigt eine zu Abbildung 6.32 analoge Versuchsserie. Für die eingestellten Einschubwinkel ϕ ist jeweils $E \cdot \phi^2 > E \cdot \phi_{\text{sp,sauber}}^2$ und $E \cdot \phi^2 > E \cdot \phi_{\text{sp,rekon}}^2$. Damit ist der Anstieg der SEE nicht mehr durch θ_{ap} bestimmt und ändert sich bei Bedeckung und Rekonstruktion nicht. Zum Vergleich sind dazu nochmals die Anstiegspunkte aus Abbildung 6.32 eingetragen. Die Fokussierungsminima für $\theta = \theta_{(112)}$ bleiben weiterhin erkennbar. Sie sind aber flacher als an der sauberen Oberfläche. Denn nach wie vor fokussieren die Atomketten der ersten Lage auf die der dritten. Doch sind die Ketten der ersten Lage wegen der Rekonstruktion nur mehr halb so dicht besetzt, was zu einer



schwächer ausgeprägten Fokussierung führt. Auch die Maxima in der Ausbeute reflektierter Ionen für $\theta = \theta_{(112)}$ sinken.

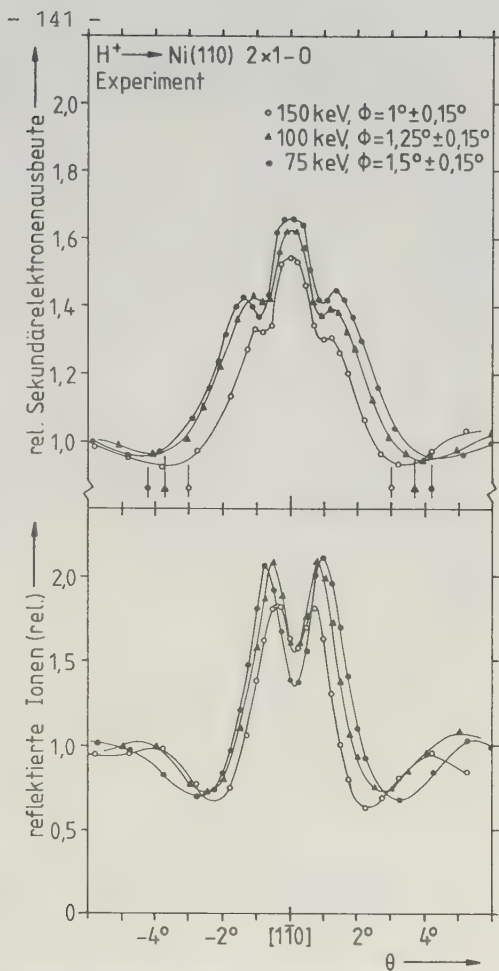
Im Rahmen der Fehlergrenzen von $\pm 2\%$ kann bei Randeinschuß ($\theta = 5^\circ$) weder eine Änderung der Reflexionsausbeute noch eine der SEE-Ausbeute festgestellt werden, wenn man mit der sauberen Oberfläche vergleicht. Das erlaubt den Schluß, daß die Änderung $\Delta\phi$ der Austrittsarbeit durch die Adsorption beim vorliegenden System (leichte schnelle Ionen, streifender Einschuß) keine spürbare Auswirkung auf die SEE hat. Die Austrittsarbeit für Ni(110) (Ni(001)) beträgt $5,04 \pm 0,02$ eV ($5,22 \pm 0,04$ eV) [130]. Sie ändert sich für Ni(110)2×1-O um $\Delta\phi = +0,45 \pm 0,05$ eV [20] und für Ni(001)c2×2-O um $\Delta\phi = +0,37 \pm 0,05$ eV [131,132]. Mit einer derart um $\Delta\phi$ höheren Oberflächenbarriere erwartet man einen Rückgang der SEE, da der Elektronenaustritt erschwert wird. Dieser Rückgang wird auch gemessen, doch beträgt er bei vergleichbarem $\Delta\phi = 0,4-0,5$ eV und Bedeckungen im Submonolagenbereich zum Beispiel im Fall von Ne⁺(500keV) → W/O nur $< 3\%$ [133] und im Fall von Ar⁺(60keV) → Mo/O nur $< 2\%$ [134], bei jeweils

Abb.7.15 : Ionenfluß-
dichteverteilung an
einer sägezahnrekon-
struierten Ni(110) -
Oberfläche, bei Ein-
schuß entlang [001],
dargestellt in einer
Ebene senkrecht zu
[001]. $T = 450 \text{ K}$
● Ni-Atomketten ,
▲ Sauerstoff.



senkrechtem Ioneneinfall. Das liegt innerhalb der Fehlergrenzen der hier durchgeführten Versuche. Außerdem ist anzunehmen, daß bei streifendem Einschluß die Bedeutung einer Austrittsarbeitserhöhung noch geringer ist. Betrachtet man nämlich das Energiespektrum emittierter Elektronen [133,134], zeigt sich, daß ein Anstieg der Austrittsarbeit nur Elektronen mit Energien $< 3 \text{ eV}$ unterdrückt. Für Energien $> 5 \text{ eV}$ ist kein Unterschied in der Emissionsausbeute zu bemerken. Da bei streifendem Einschluß mehr Elektronen in Oberflächennähe erzeugt werden als bei senkrechtem, ist der mittlere Weg eines Elektrons zur Oberfläche kürzer,

Abb. 7.16 : Messungen mit $E \cdot \phi^2 \approx \text{const.}$ in Analogie zu Abb. 6.32 bei bedeckter Oberfläche. Eingezeichnet sind auch die entsprechenden Anstiegspunkte der SEE bei sauberer Oberfläche aus Abb. 6.32. Sie bleiben für die bedeckte Oberfläche unverändert gültig. Dagegen werden die Fokussierungsminima flacher.



die Wahrscheinlichkeit von inelastischen Reaktionen geringer und die mittlere Elektronenenergie vor der Oberflächenbarriere größer. Eine Erhöhung der Barriere wird weniger wirksam. In der Abbildung 7.17 sind schließlich SEE-Profile für Einschußwinkel $\phi > \psi_{\min, (001)} = 1,5^\circ$ dargestellt, wo also für $\theta = 0^\circ$ relative Minima aufgrund planarer Gitterführung entlang (001) ins Volumen auftreten. Während die seitlichen Fokussierungsminima bei $\theta = \theta_{(112)}$ immer noch auf die Rekonstruktion reagieren, ist dies für die planaren Minima nirgends der Fall. Das unterstreicht den unterschiedlichen Charakter beider Arten von Strukturierungen.

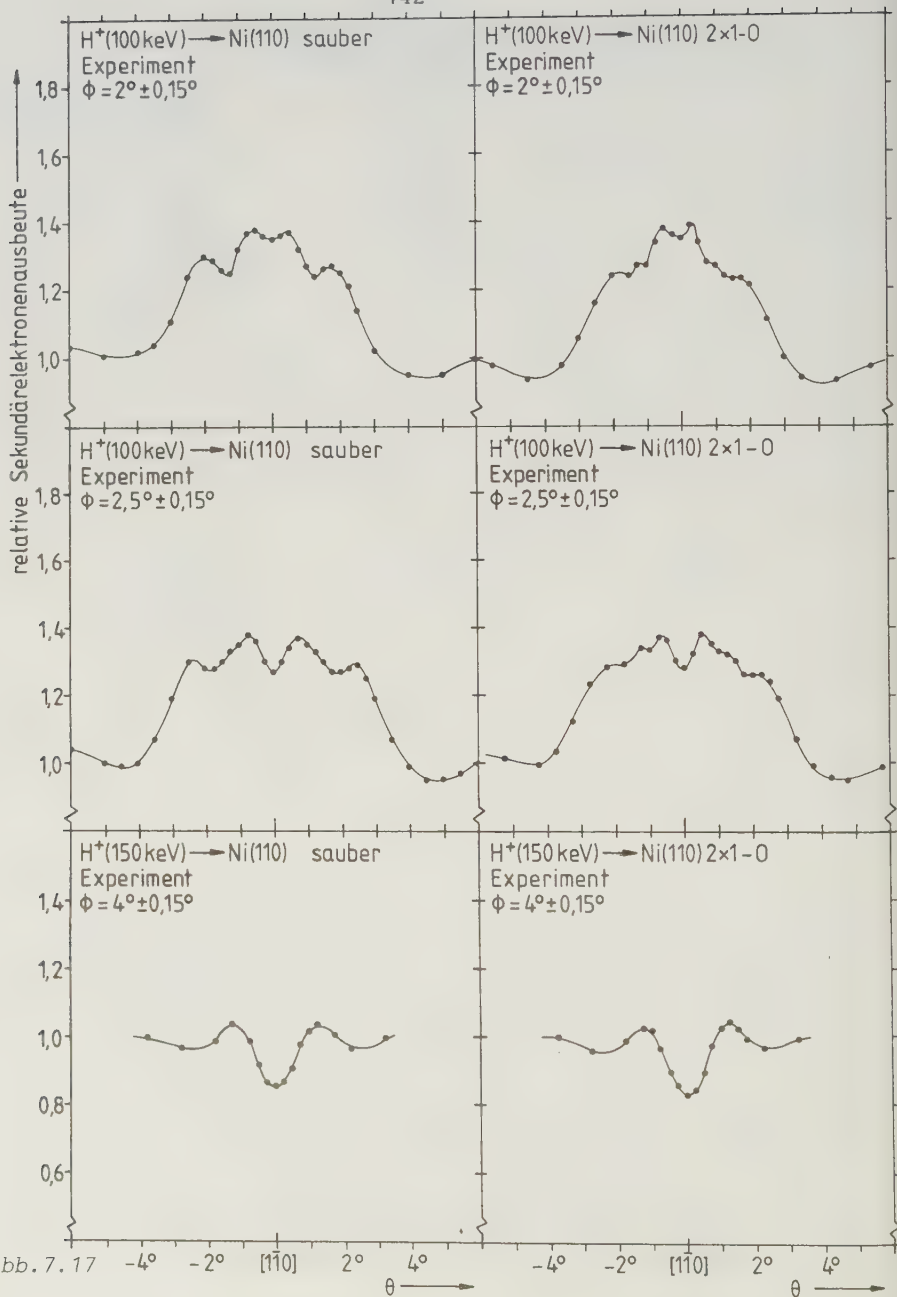


Abb. 7. 17

7.4. SEE als Funktion der Sauerstoff-Fluenz

Eine weitere interessante Möglichkeit, die Sekundärelektronenemission zu nutzen, ist ihre Messung bei festgehaltenen Einschußbedingungen Φ , Θ und E als Funktion der O_2 -Fluenz n_s , wie in den Abbildungen 7.18a,b und 7.19a,b simultan mit Reflexions-Ausbeutemessungen dargestellt. Es sind deutlich drei Abschnitte unterschiedlicher Steigung zu trennen.

Der erste Abschnitt ($0 \text{ Ex} < n_s < 5 \text{ Ex}$) entspricht gerade der Anstiegsphase des Auger-Signals aus Abbildung 7.2, mit der Ausbildung der (2×1) -Überstruktur (d.h. der Rekonstruktion). Abbildung 7.19a gibt dabei das Absinken des $[001]$ -SEE-Maximums aus Abbildung 7.14a wieder. Die zugehörige Ausbeutekurve reflektierter Ionen (Abb. 7.19b) zeigt zusätzlich ein Minimum bei $n_s = 2-3 \text{ Ex}$. Das korrespondiert zu einer LEIS-Messung von Van den Berg $[115]$, wo der dort gemessene $O[00\bar{1}]$ -Peak an der entsprechenden Stelle ein Maximum aufweist. Es wird dadurch erklärt, daß der Sauerstoff vor Ausbildung der Rekonstruktion in der 4-fachen Muldenposition adsorbiert, also inmitten sowohl des $[001]$ -, als auch des $[1\bar{1}0]$ -Kanals. Daher wird die Reflexion in beiden Richtungen gestört. Mit dem Einsetzen der Rekonstruktion und dem Einbau des Sauerstoffs in die $[001]$ -Ketten (lange Brücke) ist die $[001]$ -Richtung nicht mehr behindert, die $[1\bar{1}0]$ -Richtung jedoch nach wie vor, weswegen die Reflexionsausbeute nur hier verringert bleibt (Abb. 7.18b).

Im zweiten Abschnitt $5 \text{ Ex} < n_s < 22 \text{ Ex}$ findet man in $[1\bar{1}0]$ -Richtung nur eine leichte Zunahme der SEE und der Reflexion, in $[001]$ -Richtung nur einen leichten Rückgang der SEE und konstante Reflexion. Da aber in diesem Fluenzbereich der Übergang von der (2×1) - zur (3×1) -Struktur erfolgt, kann geschlossen werden, daß hierbei keine ähnlich gravierende Umbildung der Oberfläche eintritt, wie bei der (2×1) -Rekonstruktion der sauberen Oberfläche. Solche Umstrukturierungen zu einer (3×1) -Oberfläche unter weitgehender Beibehaltung der Ionenstreucharakteristik des Sägezahnmodells sind, beispielsweise wie in Abbildung 7.20 vorgeschlagen, denkbar.

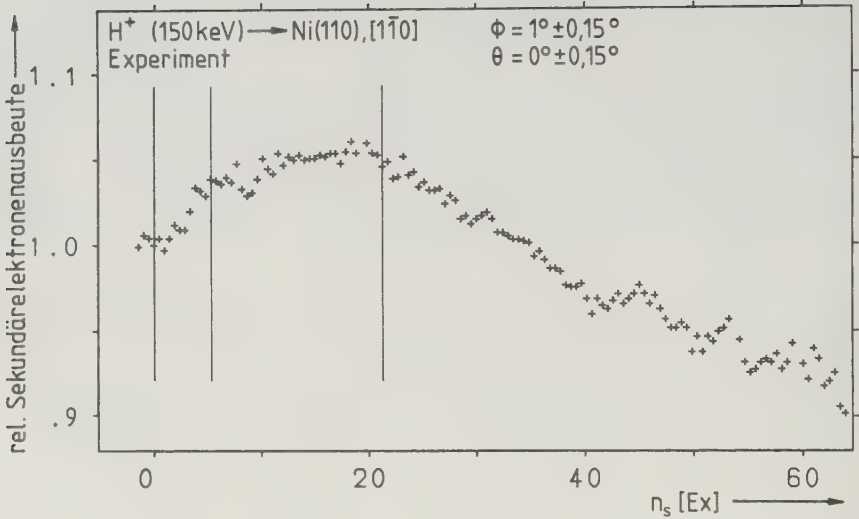


Abb.7.18a : Sekundärelektronenemission als Funktion der O_2 -Fluenz n_s , bezogen auf den Wert der sauberen Oberfläche.

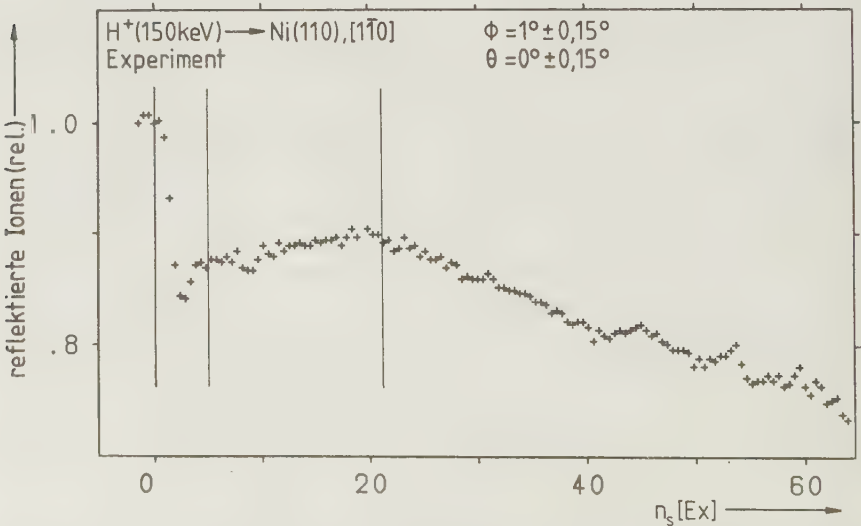


Abb.7.18b : Ausbeute reflektierter Ionen als Funktion der O_2 -Fluenz n_s , bezogen auf den Wert der sauberen Oberfläche.

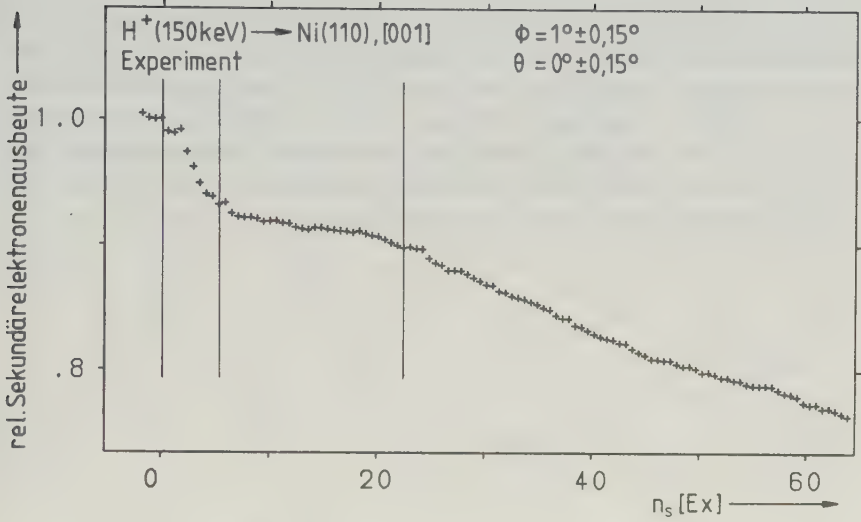


Abb.7.19a : Sekundärelektronenemission als Funktion der O_2 -Fluenz n_s , bezogen auf den Wert der sauberen Oberfläche.

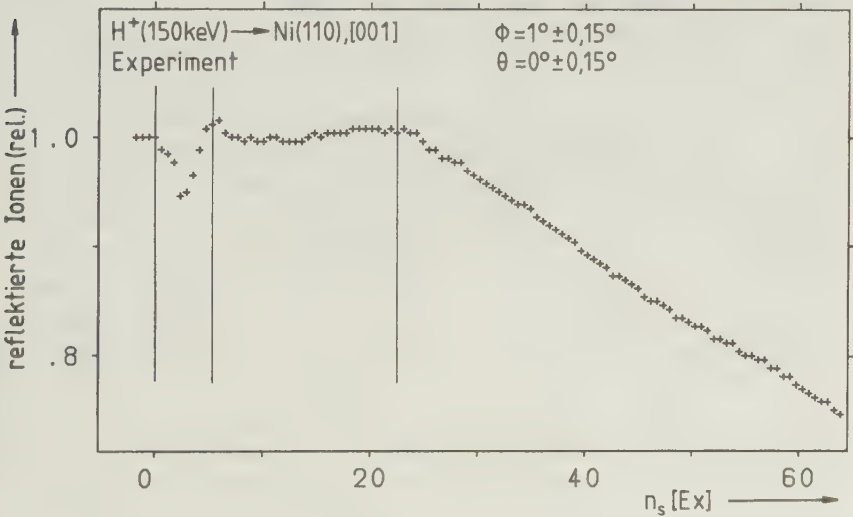


Abb.7.19b : Ausbeute reflektierter Ionen als Funktion der O_2 -Fluenz n_s , bezogen auf den Wert der sauberen Oberfläche.

Der letzte Abschnitt $n_s > 22$ Ex setzt sehr abrupt ein (im Gegensatz zum $(2 \times 1) \rightarrow (3 \times 1)$ -Übergang) und führt zu einem linearen Rückgang sowohl der Reflexion, als auch der SEE-Ausbeute (vgl. [115]). Das läßt erkennen, daß mit Auftreten der (9×4) -Struktur (Pseudo-Oxid [135]) und mit Einsetzen der NiO-Bildung die axiale Gitterführung zunehmend schlechter wird und sich eine völlig andere Oberflächenstruktur bildet.

[001]: $\odot$

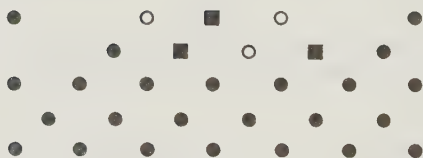


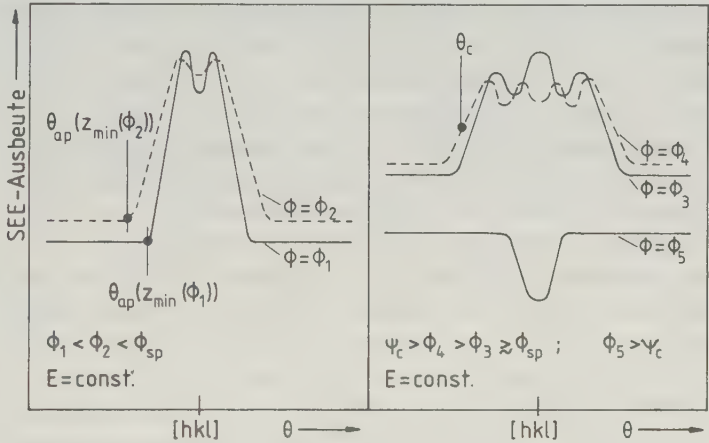
Abb. 7.20 : ● + ○ 2×1 -Sägezahn
● + ■ 3×1 -*"Sägezahn"*

8. Überblick

Anhand schematischer Kurven soll ein Überblick über die wesentlichen Ergebnisse der Abschnitte 6 und 7 vermittelt werden.

Abb. 8.1
(links)

Abb. 8.2
(rechts)



Die ioneninduzierte Sekundärelektronenemission (SEE) wird maximal bei Ioneneinschuß unter Bedingungen axialer Oberflächengitterführung. Der Einschußwinkel zur Oberfläche ist ϕ , der azimutale Winkel zur niederindizierten Richtung [hkl] in der Oberfläche ist θ . Die Breite eines SEE-Maximums läßt sich für $\phi < \phi_{sp}$, dem kritischen Winkel planarer Oberflächengitterführung aus (4.4), durch den Winkel θ_{ap} aus (4.8) charakterisieren. Hier geht die planare in axiale Oberflächengitterführung über. Nach (4.8) werden die SEE-Profile bei konstanter Einschußenergie E für steigendes ϕ breiter (Abb. 8.1, $\phi_1 < \phi_2$, $\theta_{ap}(\phi_1) < \theta_{ap}(\phi_2)$), da der

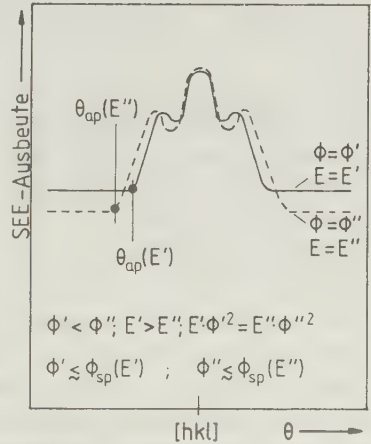


Abb. 8.3

Minimalabstand $z_{\min}$ zwischen Ionenbahn und Oberfläche bei planarer Oberflächengitterführung, der in (4.8) eingeht, für steigendes ϕ kleiner wird. Die SEE-Profile werden nach (4.8) auch breiter mit sinkendem E , aber konstanter Querenergie $E \cdot \phi^2$, da dann $z_{\min} = \text{const.}$ (Abb.8.3). Für $\phi > \phi_{sp}$ kann man die Halbwertsbreite der Profile mit $\theta_c = (\psi_c^2 - \phi^2)^{1/2}$ abschätzen, wobei ψ_c den kritischen Winkel axialer Gitterführung nach (4.3) bezeichnet (Abb.8.2, $\phi = \phi_4$). Für $\phi > \psi_c$ findet man kein SEE-Maximum durch axiale Oberflächengitterführung mehr, sondern ein SEE-Minimum durch planare Gitterführung ins Volumen (Abb.8.2, $\phi = \phi_5$).

Bei $E = \text{const.}$ wächst die Randomausbeute der SEE mit steigendem ϕ bis etwa $0,3^\circ$ über ϕ_{sp} , da die Spiegelreflexion abnimmt. Für grössere ϕ sinkt sie wieder (Abbn.8.1 und 8.2). Sie sinkt auch für kleineres E (Abb.8.3). Strukturen (relative Minima) in den SEE-Profilen bei $\theta = 0^\circ$ (Abbn.8.1 und 8.2, $\phi = \phi_4$) sind entweder durch Fokussierung einfallender Teilchen auf Atomketten der zweiten Atomlage bedingt (bei Semikanälen) oder durch planare Gitterführung ins Volumen. Dazu muß ϕ größer als der Grenzwinkel $\psi_{\min}$ aus (4.6) sein, ab dem planare Gitterführung erst möglich ist. Ist das nicht erfüllt und liegt auch keine Fokussierung vor, erhält man bei $\theta = 0^\circ$ ein Maximum (Abb.8.2, $\phi = \phi_3$). Strukturen bei $\theta \neq 0^\circ$ (Abbn.8.2 und 8.3) entstehen durch Fokussierung auf Atomketten der zweiten oder dritten Atomlage. Für kleineres E werden die Fokussierungsstrukturen deutlicher (Abb.8.3).

Oberflächenrauigkeit reduziert für $\phi < \phi_{sp}$ die Spiegelreflexion und führt zu einem Anstieg des Randomwerts der SEE (Abb.8.4). Die relative Höhe eines SEE-Maximums wird dadurch verringert. Außerdem werden Fokussierungsstrukturen schwächer oder verschwinden bei stärkerer Oberflächenrauigkeit gänzlich (Abb.8.4).

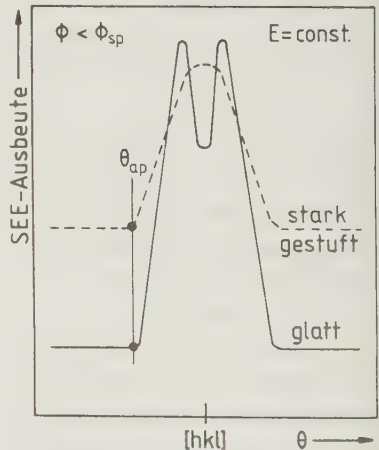


Abb.8.4

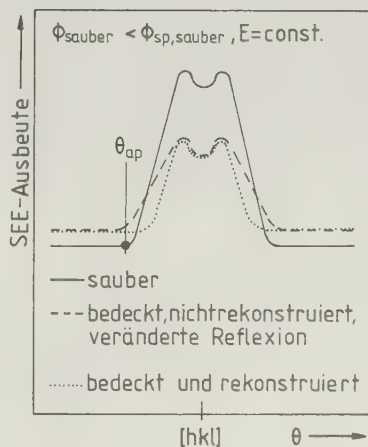
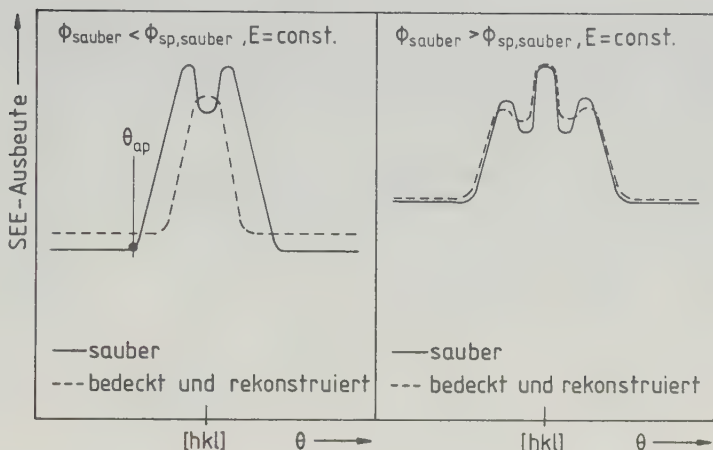


Abb. 8.7

Kommt es durch Fremdatomadsorption zu einer Oberflächenrekonstruktion, verändert sich für $\phi < \phi_{\text{sp,sauber}}$ die Kurvenbreite (Ni(110)2x1-O, [110]; Abb.8.5). Denn zum einen ist bei veränderter Atomdichte an der Oberfläche $\theta_{\text{ap,sauber}}$ nach (4.8) nicht mehr gültig. Zum andern führt die neue Geometrie der rekonstruierten Oberfläche zu veränderter Ionenflußdichte und veränderter Reflektivität, was ebenfalls die Profilbreite beeinflusst. Aus demselben Grund deuten das Verschwinden (Abb.8.5) oder die Verflachung von Fokussierungsstrukturen (noch bei $\phi > \phi_{\text{sp}}$, Abb.8.6) auf Rekonstruktion hin (Ni(110)2x1-O, [110]).

Bedeckung ohne Rekonstruktion hat keine Änderung von θ_{ap} und der Kurvenbreite zur Folge (Abbn.8.7 und 8.8; Ni(001)c2x2-O, [110] oder NiFe(110)3x1-O, [112] aus [21]).

Führt die Bedeckung zu einer Verringerung der Höhe eines SEE-Maximums (Abb.8.7) und liegt keine Rekonstruktion vor, läßt sich daraus auf die Adsorbatposition schließen ($\text{NiFe}(110)3 \times 1\text{-O}$, $[\bar{1}\bar{1}2]$ aus $[21]$). Bei gleichzeitiger Rekonstruktion kann ein flacheres SEE-Maximum auch nur durch die veränderte Substratoberfläche ohne Beteiligung der Adsorbatatome bedingt sein (Abb.8.7, $\text{Ni}(110)2 \times 1\text{-O}$, $[001]$).

Ohne deutliche Ionenflußdichteänderung durch eine Rekonstruktion oder durch das Adsorbat ist, wie in allen Fällen für $\phi < \phi_{sp}$, bei Bedeckung nur ein um etwa 10% höherer Randomwert der SEE-Ausbeute festzustellen (Abb.8.8, $\text{Ni}(001)c2 \times 2\text{-O}$, $[110]$).

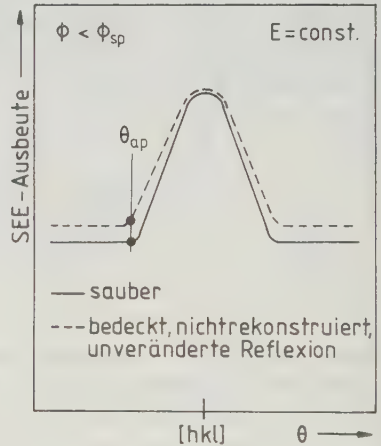
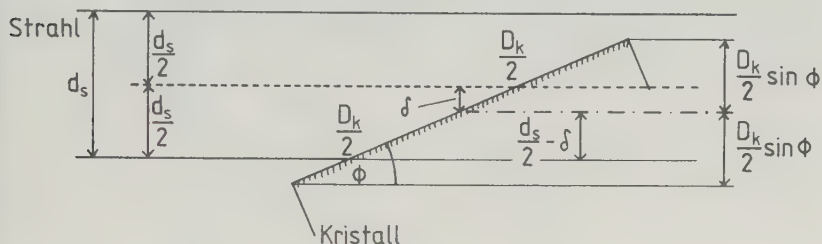


Abb.8.8

Anhang

I. Korrekturfaktoren für kleine Einschubwinkel $\Phi < 1^\circ$ unter Berücksichtigung einer Fehljustierung δ :



Anteil τ des Strahls, der auf die Oberfläche trifft :

$$\min(0,5 \cdot d_s - \delta; 0,5 \cdot D_k \cdot \sin \Phi) + \min(0,5 \cdot d_s + \delta; 0,5 \cdot D_k \cdot \sin \Phi)$$

$$\tau = \frac{\quad}{d_s}$$

τ für $d_s = 0,2 \text{ mm}$:

Φ	$0,5^\circ$	$0,6^\circ$	$0,7^\circ$	$0,75^\circ$	$0,8^\circ$	$0,9^\circ$	$1,0^\circ$	$1,1^\circ$	$1,2^\circ$
$\delta [\text{mm}]$									
0,0	0,61	0,73	0,86	0,92	0,98	1,00			
0,01	0,61	0,73	0,86	0,91	0,94	1,00			
0,02	0,61	0,73	0,83	0,86	0,89	0,95	1,00		
0,03	0,61	0,73	0,78	0,81	0,84	0,9	0,96	1,00	
0,04	0,61	0,73	0,73	0,76	0,79	0,85	0,91	0,97	1,00

τ für $d_s = 0,22 \text{ mm}$:

Φ	$0,5^\circ$	$0,6^\circ$	$0,7^\circ$	$0,75^\circ$	$0,8^\circ$	$0,9^\circ$	$1,0^\circ$	$1,1^\circ$	$1,2^\circ$
$\delta [\text{mm}]$									
0,0	0,56	0,67	0,78	0,83	0,89	1,00			
0,01	0,56	0,67	0,78	0,83	0,89	0,95	1,00		
0,02	0,56	0,67	0,78	0,83	0,85	0,91	0,96	1,00	
0,03	0,56	0,67	0,75	0,78	0,81	0,86	0,92	0,97	1,00
0,04	0,56	0,67	0,71	0,73	0,76	0,82	0,87	0,93	1,00

II. Werte der Normierungskonstanten c_1 (5.30) für Ni :

$\hat{b}/a_{tf}[\text{nm}^{-1}]$	0	10	20	30	40	50	60	65
c_1	1,0	2,7	6,8	15,3	31	57	96	121

III. Werte der Normierungskonstanten c_2 (5.34) für Ni(110) :

$b/a_{tf}[\text{nm}^{-1}]$	0	5	10	15	20	25	30
$c_2, [\bar{1}\bar{1}0]$	1,00	1,75	2,89	4,55	6,81	9,75	13,40
$c_2, [001]$	1,00	1,59	2,44	3,63	5,21	7,25	9,78
$c_2, [\bar{1}\bar{1}2]$	1,00	1,53	2,26	3,26	4,58	6,24	8,30

$b/a_{tf}[\text{nm}^{-1}]$	35	40	45	50	55	60
$c_2, [\bar{1}\bar{1}0]$	17,80	22,95	28,84	35,46	42,82	50,90
$c_2, [001]$	12,83	16,41	20,53	25,17	30,34	36,04
$c_2, [\bar{1}\bar{1}2]$	10,76	13,65	16,97	20,72	24,91	29,53

IV. Entsprechung von $\hat{b}$ (5.31) und b (5.32) (least square Vergl.)

$\hat{b}/a_{tf}[\text{nm}^{-1}]$	0	10	20	30	40	50	60
$b/a_{tf}[\text{nm}^{-1}]$ $[\bar{1}\bar{1}0]$	0	5-7,5	15	22,5	30	40	47,5
$[\bar{1}\bar{1}0]$	0	7,5	15	22,5	32,5	40	50
$[\bar{1}\bar{1}0]$	0	7,5	15	22,5	32,5	40	47,5-50

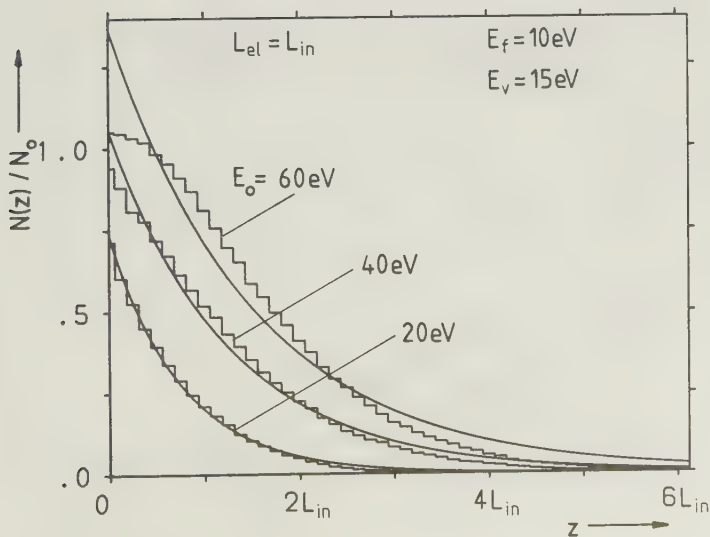
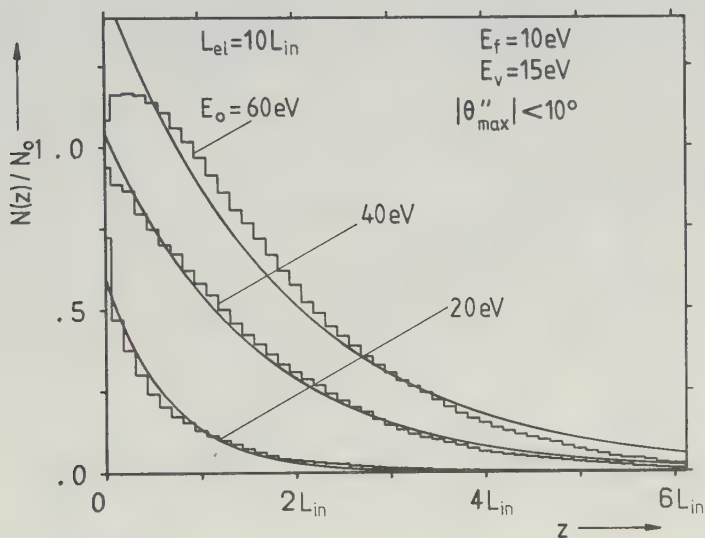
V. Werte der Normierungskonstanten c_2 (5.34) für Ni(110),
speziell für He mit $a_{tf}=0,0142 \text{ nm}$ (Programm) :

b	0	0,05	0,1	0,15	0,2	0,25	0,3	0,35	0,4
$c_2, [\bar{1}\bar{1}0]$	1,00	1,49	2,15	3,04	4,19	5,62	7,38	9,47	11,91
$[001]$	1,00	1,39	1,90	2,55	3,37	4,38	5,60	7,06	8,75
$[\bar{1}\bar{1}2]$	1,00	1,35	1,80	2,36	3,05	3,89	4,90	6,08	7,46

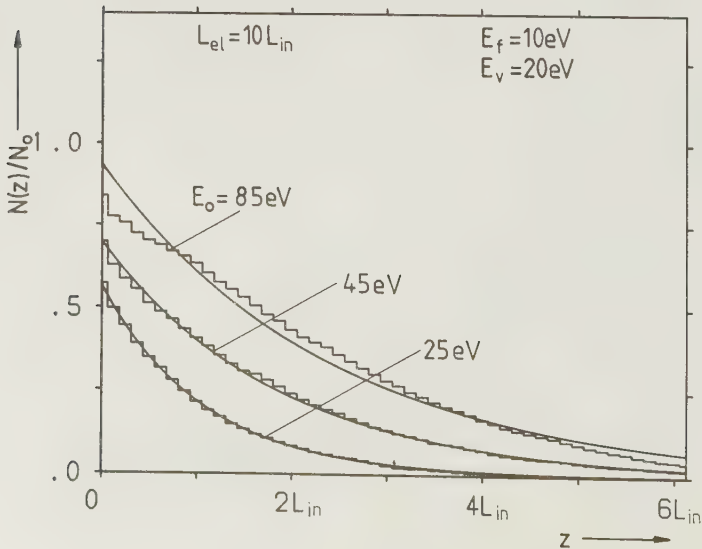
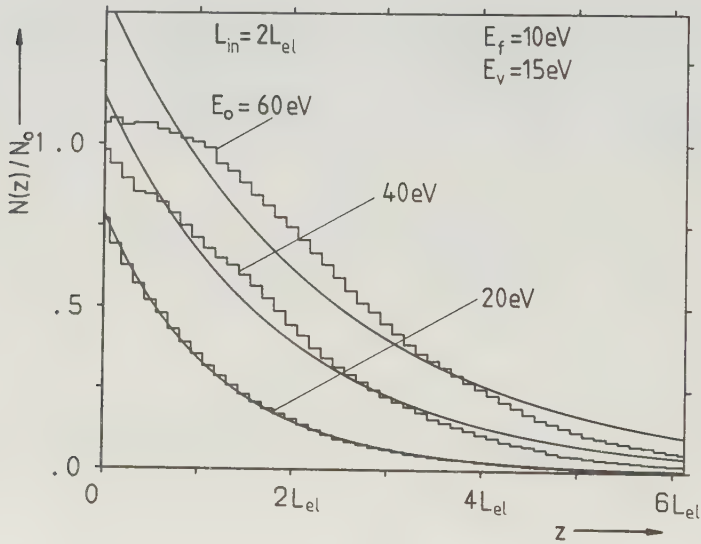
b	0,45	0,5	0,55	0,6	0,65	0,7	0,75	0,8	0,85
$c_2, [\bar{1}\bar{1}0]$	14,72	17,90	21,44	25,35	29,63	34,27	39,27	44,62	50,34
$[001]$	10,69	12,90	15,36	18,09	21,08	24,33	27,85	31,64	35,64
$[\bar{1}\bar{1}2]$	9,03	10,81	12,80	15,00	17,42	20,04	22,89	25,94	29,21

b	0,9	0,95	1,0
$c_2, [\bar{1}\bar{1}0]$	56,41	62,83	69,60
$[001]$	39,92	44,45	49,24
$[\bar{1}\bar{1}2]$	32,68	36,37	40,26

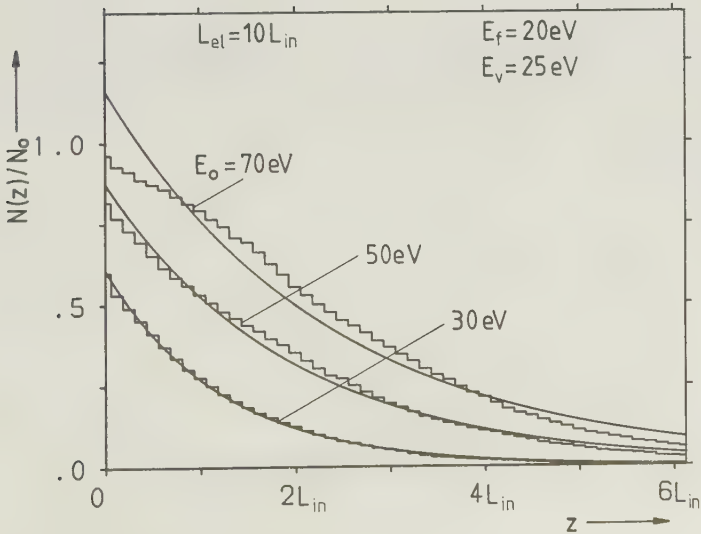
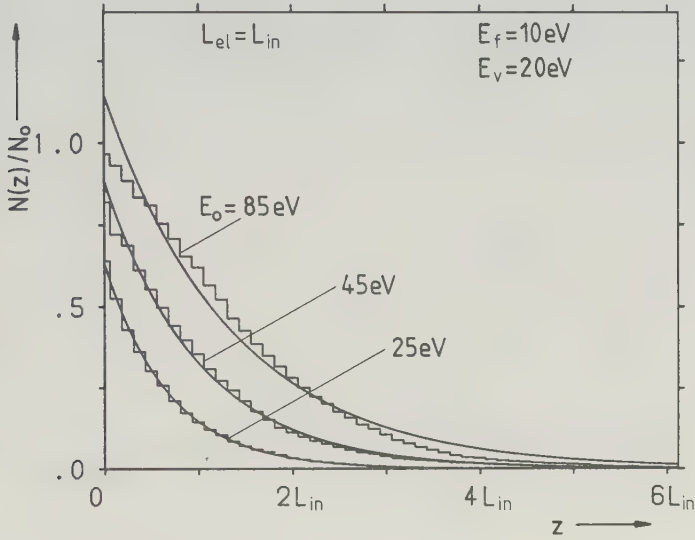
VI. Weitere Simulationsergebnisse zum Austritt der Sekundärelektronen (vgl. Abschnitt 5.4) für verschiedene Werte und Kombinationen der Parameter L_{in}/L_{el} , E_F , E_V und E_O (Startenergie) :



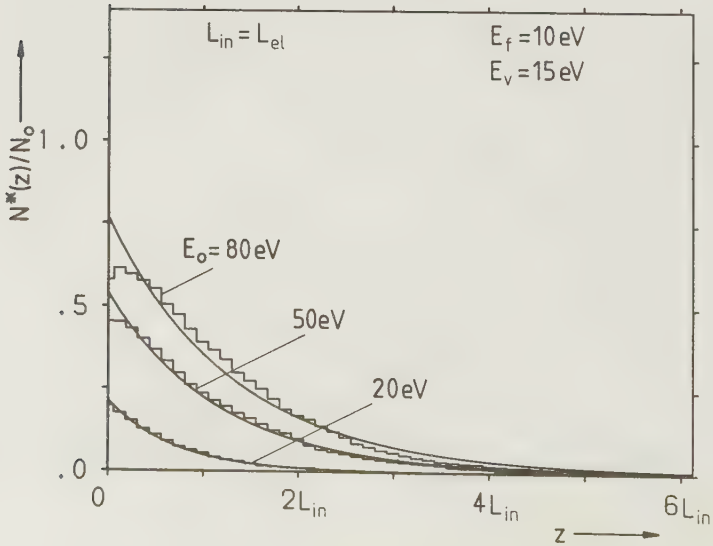
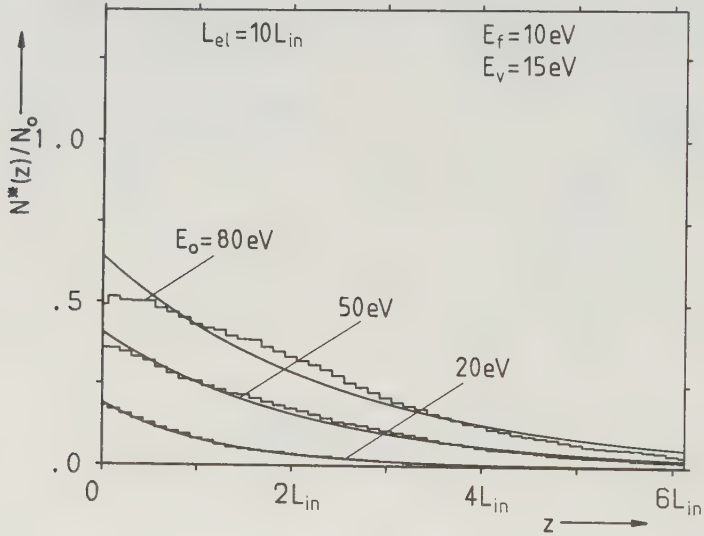
Weitere Simulationsergebnisse zum Austritt der Sekundärelektronen (vgl. Abschnitt 5.4) für verschiedene Werte und Kombinationen der Parameter L_{in}/L_{el} , E_F , E_V und E_O (Startenergie) :



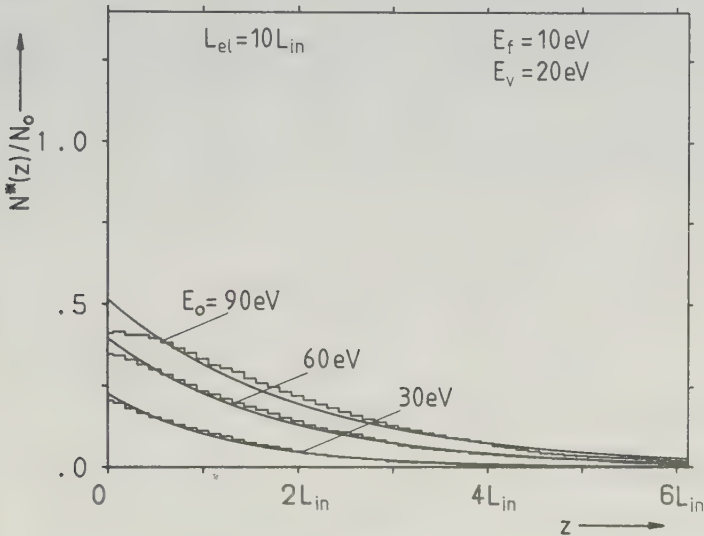
Weitere Simulationsergebnisse zum Austritt der Sekundärelektronen (vgl. Abschnitt 5.4) für verschiedene Werte und Kombinationen der Parameter L_{in}/L_{el} , E_F , E_V und E_O (Startenergie) :



Weitere Simulationsergebnisse zum Austritt der Sekundärelektronen (vgl. Abschnitt 5.4) für verschiedene Werte und Kombinationen der Parameter L_{in}/L_{el} , E_f , E_v und E_o (Startenergie) :



Weitere Simulationsergebnisse zum Austritt der Sekundärelektronen (vgl. Abschnitt 5.4) für verschiedene Werte und Kombinationen der Parameter L_{in}/L_{el} , E_F , E_V und E_O (Startenergie) :



Simulationen mit Berechnung von $N(z)/N_0$:

vorgegebene Parameter :					inelast. Stöße	elast. Stöße	neue Elektr.	L/L_{in}
E_F [eV]	E_V [eV]	$\frac{L_{el}}{L_{in}}$	θ''_{max}	E_O [eV]	bis zum Abbruch			
10	15	10		60	18,9	1,9	4	2,3
				40	11	1,1	2	1,9
				20	3	0,3	0	1,2
10	15	10	10^0	60	18,8	1,8	4	1,9
				40	11	1,1	2	1,6
				20	3	0,3	0	0,7
10	15	1		60	19	18,8	4	1,5
				40	11	11	2	1,3
				20	3	2,9	0	0,8
10	15	0,5		60	18,8	37,3	4	1,2
				40	10,9	21,8	2	0,9
				20	3	5,9	0	0,6

Simulationen mit Berechnung von $N(z)/N_0$:

vorgegebene Parameter :					inelast.	elast.	neue	L/L _{in}
E _F	E _V	$\frac{L_{el}}{L_{in}}$	θ''_{max}	E _O	Stöße	Stöße	Elektr.	
[eV]	[eV]	$\frac{L_{el}}{L_{in}}$		[eV]	bis zum Abbruch			
10	20	10		85	13,8	1,3	1,4	2,4
				45	5,9	0,6	0,8	1,8
				25	2	0,2	0	1
10	20	1		85	14	13,8	2,8	1,4
				45	6	5,9	0,8	1
				25	2	2	0	0,7
20	25	10		70	18,9	1,9	4	2,4
				50	11	1,1	2	1,2
				30	3	0,3	0	1,2

Simulationen mit Berechnung von $N^*(z)/N_0$:

vorgegebene Parameter :					inelast.	elast.	neue	L/L _{in}
E _F	E _V	$\frac{L_{el}}{L_{in}}$	θ''_{max}	E _O	Stöße	Stöße	Elektr.	
[eV]	[eV]	$\frac{L_{el}}{L_{in}}$		[eV]	bis zum Abbruch			
10	15	10		80	26,7	2,7	6	2,5
				50	15	1,5	3	2,1
				20	2,9	0,3	0	1,1
10	15	1		80	26,9	26,9	6	1,3
				50	15,1	15	3	1,2
				20	3	2,9	0	0,7
10	20	10		90	14,8	1,5	3	2,1
				60	8,9	0,9	1,5	1,8
				30	3	0,3	0	1,3

Computerprogramm

Als Beispiel für die Simulationsprogramme ist im folgenden die FORTRAN IV - Version des Programms für den Einschuß von He auf Ni(110) entlang [110] wiedergegeben. Die Eingabeparameter, mit denen auch Sauerstoffbedeckung, Rekonstruktion und Stufendichte vorgegeben werden, werden aus der Datei INPUT eingelesen. Sie sind in entsprechenden Kommentaren beschrieben. Die Ergebnisse werden druckaufbereitet in der Datei RESULT abgelegt. Der Anschluß weiterer Dateien oder Bibliotheksprogramme ist nicht nötig.

```

PROGRAM IEE110(INPUT,OUTPUT,RESULT,TAPE1=INPUT,TAPE2=OUTPUT,
+           TAPE3=RESULT)
C
C  DAS PROGRAMM SIMULIERT DEN EINSCHUSS VON HELIUM-IONEN
C  AUF EINE NICKEL-(110)-OBERFLAECHE IN [1-10]-RICHTUNG.
C  DAS PROGRAMM GESTATTET DIE SIMULATION EINER MISSING-ROW-
C  UND EINER SAEGEZAHN-OBERFLAECHEENREKONSTRUKTION, SOWIE
C  DIE SIMULATION EINER REKONSTRUIERTEN UND SAUERSTOFFBEDECKTEN
C  NI-OBERFLAECHE.
C  ES BESTEHT DIE MOEGlichkeit EINE GESTUFTE TARGETOBERFLAECHE
C  NACHZUBILDEN UND ZWAR MIT FOLGENDEN OPTIONEN :
C  - ZWEI VERSCHIEDENE STUFENLAENGEN ("PLATEAUS UND STEILSTUFEN")
C  - NUR AUFWAERTSSTUFEN
C  - PYRAMIDEN
C  - KRATER.
C
C  DIMENSION ATFINV(2),CONST(2),FLUX(51,11),FPL(10),FPLINV(10),
+           TGI(10),PHIOUT(10),THETA(20),CRDPH(30),ZIEGLER(50),
+           DEPNORM(21),TGI1(10),PHI(20),STOSTA(15,20),PHIION(10)
C  INTEGER STEP,OX,SL1,SL2,SN,STPER1,STPER2,TRACE
C
C  DATEN VON NI(110),[1-10] :           AZ,AZ2,AY,AY2 :
C                                           GITTERABSTAEENDE [A] BZW.
C                                           DAVON ABGELEITETE GROESSEN
C                                           DPL,DPL2 : STREUEBENENABSTAND [A]
C                                           DPL2 = 0.5*DPL
C                                           UTERM : KONSTANTE FUER THER-
C                                           MISCHE GITTERSCHWINGUNGEN
C
C  DATA AY,AY2,AZ,AZ2,DPL,DPL2,UTERM/3.524,1.762,
+       2.4919,1.2459,1.2459,0.6231,0.004/
C
C  TABELLE : EMPIRISCHER ENERGIEVERLUST VON HE IN NI NACH
C  ZIEGLER IN KEV/A
C
C  DATA (ZIEGLER(I),I=1,50)/.00886,.01216,.01463,.01669,.01848,
+   .02008,.02155,.02290,.02417,.02536,.02649,.02756,.02859,
+   .02957,.03052,.03143,.03232,.03317,.03400,.03481,.03559,
+   .03635,.03710,.03783,.03854,.03924,.03992,.04059,.04124,
+   .04189,.04252,.04314,.04375,.04435,.04494,.04552,.04610,
+   .04666,.04722,.04777,.04831,.04884,.04937,.04989,.05041,
+   .05091,.05142,.05191,.05240,.05289/

```

```

C   TABELLE : NORMIERUNGSFAKTOR DEPNORM DES STOSSPARAMETERABHAENGIGEN
C   TEILS DES ENERGIEVERLUSTS/ELEKTRONENPRODUKTION
C
C   DATA (DEPNORM(I),I=1,21)/1.0,1.49,2.15,3.04,4.19,5.62,7.38,
+   9.47,11.91,14.72,17.90,21.44,25.35,29.63,34.27,39.27,
+   44.63,50.34,56.41,62.83,69.60/
C
C   DATEN ZUR BESTIMMUNG DER MITTLEREN PROJIZIERTEN REICHWEITE ZUR
C   ABSCHAETZUNG DER ELEKTRONENPRODUKTION NACH TRAJEKTORIEN-
C   ABRUCH; BESCHREIBUNG NACH ZIEGLER MIT POTENZGESETZ
C
C   DATA FAKTOR,EXPON/90.0,0.78/
C
C   DATEN FUER DIE STREUFORMEL : ATFINV : INVERSER THOMAS-FERMI-
C                                   ABSCHIRMRADIUS
C                                   CONST : KONSTANTE IN STREUFORMEL
C                                   1=HE-NI,2=HE-O
C
C   DATA(ATFINV(I),I=1,2)/7.01992,5.04730/
C   DATA(CONST(I),I=1,2)/5.66086,1.1629/
C
C   DATEN ZUM PROGRAMMABLAUF : TAN25SQ : (TAN 25 GRD)**2,VGL.ABRUCHKRIT.
C                                   ZSTART : STARTHÖHE DES PROJEKTILS [A]
C                                   AYINV11 : INV.FLUX-RASTERWEITE IN Y-RICHTUNG
C                                           = 11/AY
C                                   AZINV10 : INV.FLUX-RASTERWEITE IN Z-RICHTUNG
C                                           = 10/AZ
C                                   AZINV2 : INV.CRDPTH-RASTERWEITE = 2/AZ
C   DATA TAN25SQ,ZSTART,AYINV11,AZINV10,AZINV2/0.2174,
+   6.0,3.1215,4.013,0.8026/
C
C   ALLGEMEINE DATEN : RAD : UMRECHNUNG GRAD-BOGEN
C                                   RADINV : UMRECHNUNG BOGEN-GRAD
C   DATA RAD,RADINV/0.017453,57.29578/
C
C   EINLESEN VON DATEN : EEIN : PROJEKTIENERGIE [KEV],EEIN < 250 KEV
C                                   NPHI : ZAHL DER ZU RECHNENDEN EINSCHUSSWINKEL
C                                   ZUR OBERFLÄCHE
C                                   1 <= NPHI <= 20
C                                   NTHETA : ZAHL DER ZU RECHNENDEN EINSCHUSSWINKEL
C                                   ZUR NIEDERINDIZIERTEN RICHTUNG
C                                   1 <= NTHETA <= 20
C                                   NINCX,NINCY : NINCX*NINCY IST DIE ZAHL DER
C                                   INSGESAM EINGESCHOSSENEN TEILCHEN
C                                   NSTOP : PRO TEILCHEN WERDEN MAXIMAL NSTOP
C                                   STOSSE BERECHNET (SICHERHEITSSABBRUCH)
C                                   T : TARGETTEMPERATUR [K]
C                                   STEP : STEUERPARAMETER STUFEN =0 KEINE STUFEN
C                                           =1 AUFWAERTSSTUFEN
C                                           =2 PYRAMIDEN
C                                           =3 KRATER
C                                   OX : STEUERPARAMETER SAUERSTOFFBEDECKUNG
C                                           =0 KEINE BEDECKUNG
C                                           =1 SAUERSTOFFBEDECKUNG
C                                           NUR MIT NREK=1,2
C                                   NREK : STEUERPARAMETER REKONSTRUKTION

```

```

C                                     =0 KEINE REKONSTRUKTION
C                                     =1 MISSING ROW
C                                     =2 SAEGEZAHN
C   NRFPL : ANZAHL DER VERSCHIEDENEN FREIEN
C           WEGLAENGEN FUER ELEKTRONEN
C           1 <= NRFPL <= 10
C   ALPHA : BESTIMMT AUFTEILUNG ZWISCHEN
C           STOSSPARAMETERABHAENGIGEM UND
C           -UNABHAENGIGEM TEIL DES ENERGIE-
C           VERLUSTS
C           0 <= ALPHA <= 1
C   BETA : BESTIMMT STOSSPARAMETERABHAENGIGKEIT DES
C           ENERGIEVERLUSTS
C           0.0 <= BETA <= 1.0
C   GAMMA : FREIER ELEKTRONENGASAUFLAEUFER
C           UEBER DER OBERFLAECHE [A]
C   TRACE : TRACE = 1 BEWIRKT DEN AUSDRUCK ALLER
C           WICHTIGEN EINZELDATEN EINER
C           TRAJEKTORIE ZU TESTZWECKEN;
C           DABEI WIRD NINCX=NINCY=NTHETA=1
C           UND NSTOP=500 GESETZT.
C           TRACE = 0 UNTERDRUECKT DIESE VOLL-
C           STAENDIGE FORM DER AUSGABE
C
C   READ(1,*) EEIN,NPHI,NTHETA,NINCX,NINCY,NSTOP,T,STEP,NREK,
+       OX,NRFPL,ALPHA,BETA,GAMMA,TRACE
C   REKON=FLOAT(NREK)
C   REKAZ2 = REKON*AZ2
C   REKGAM = REKAZ2 + GAMMA
C   NINC = NINCX*NINCY
C   IF(TRACE.EQ.1) NINC = NTHETA = NPHI = 1
C
C   EINLESEN VON NPHI EINSCHUSSWINKELN PHI
C
C   DO8 I=1,NPHI
C   READ(1,*) ZPHI
C   PHI(I) = ZPHI
C
C   EINLESEN VON NTHETA EINSCHUSSWINKELN THETA
C
C   DO10 I=1,NTHETA
C   READ(1,*) ZTHETA
C   THETA(I) = ZTHETA
C
C   WRITE(3,99999) EEIN,T,NINC,ALPHA,BETA,GAMMA
C   99999 FORMAT(1H1,120(1H=),/,1H0,*VORGEGEBENE DATEN : *,/,1H0,120(1H=),/,
+       1H0,*EINSCHUSS VON HE-IONEN AUF NI(110),[1-10]*,/,
+       1H0,*PROJEKTIENERGIE [KEV]: *,F8.2,/,
+       1H ,*KRISTALLTEMPERATUR [K]: *,F8.2,/,
+       1H ,*ANZAHL VON PROJEKTILEN: *,I8,/,
+       1H ,*ALPHA,ENERGIEVERLUST : *,F8.2,/,
+       1H ,*BETA,ENERGIEVERLUST : *,F8.2,/,
+       1H ,*GAMMA,AUSLAUEFER [A] : *,F8.2)
C
C   EINLESEN VON NRFPL FREIEN WEGLAENGEN FUER ELEKTRONEN
C   FPL(I) > 0.0
C

```

```

DO11 I=1,NRFPL
READ(1,*) XLAMBDA
FPL(I) = XLAMBDA
FPLINV(I) = 1.0/XLAMBDA
11  CONTINUE
C
IF(STEP.EQ.0) GOTO 30
C
C   EINLESEN VON STUFENDATEN : SL1 : STUFENLAENGE 1 = "PLATEAULAENGE"
C                               [IN GITTERKONSTANTEN AX]
C   SL2 : STUFENLAENGE 2 = "STEILSTUFENLAENGE"
C                               [IN GITTERKONSTANTEN AX]
C   SN : ZAHL DER AUFWAERTSSTUFEN (STEP=1)
C        BZW. ZAHL DER AUFWAERTS- = ZAHL DER
C        ABWAERTSSTUFEN (STEP=2,3)
C
READ(1,*) SL1,SL2,SN
C
C   STPER2 ("STUFENPERIODE") STEUERT IM FALL STEP=2,3 DEN WECHSEL VON
C   AUFWAERTS- ZU ABWAERTSSTUFEN BZW. UMGEKEHRT
C
STPER2 = SL1 + SN*SL2
C
C   ERSTELLEN EINES AUSDRUCKS UND BESTIMMUNG VON STPER1 UND STDIR IN
C   ABHAENGIGKEIT VON STEP : STPER1 : PERIODENLAENGE, MIT WELCHER SICH
C                               DAS STUFENSHEMA WIEDERHOLT [AX]
C   STDIR : STEUERT, OB MIT AUFWAERTS- ODER
C           ABWAERTSSTUFEN BEGONNEN WIRD,
C           SOWIE STUFENHOEHE
C
IF (STEP.EQ.3) GOTO 19
IF (STEP.EQ.2) GOTO 18
STPER1 = STPER2
STDIR = AZ2
WRITE(3,99998)
99998 FORMAT(1H0,*MIT AUFWAERTSSTUFEN: *)
GOTO 20
18  STPER1 = SL1 + 2*SN*SL2
STDIR = AZ2
WRITE(3,99997)
99997 FORMAT(1H0,*MIT PYRAMIDEN      : *)
GOTO 20
19  STPER1 = SL1 + 2*SN*SL2
STDIR = -AZ2
WRITE(3,99996)
99996 FORMAT(1H0,*MIT KRATERN        : *)
20  WRITE(3,99995) SL1,SL2,SN
99995 FORMAT(1H+,22X,*PLATEAULAENGE SL1      :*,I8,/,
+           1H ,22X,*STEILSTUFENLAENGE SL2  :*,I8,/,
+           1H ,22X,*STEILSTUFENZAHZ SN      :*,I8)
GOTO 40
30  WRITE(3,99994)
99994 FORMAT(1H0,*KEINE STUFEN*)
C
C   ERSTELLEN EINES AUSDRUCKS IN ABHAENGIGKEIT VON NREK
C
40  IF(NREK.NE.0) GOTO 41

```

```

WRITE(3,99005)
99005 FORMAT(1H0,"KEINE REKONSTRUKTION")
      GOTO 45
41    IF(NREK.EQ.2) GOTO 43
      WRITE(3,99004)
99004 FORMAT(1H0,"MISSING ROW REKONSTRUKTION")
      GOTO 45
43    WRITE(3,99001)
99001 FORMAT(1H0,"SAEGEZAHNREKONSTRUKTION")
C
C      ERSTELLEN EINES AUSDRUCKS IN ABHAENGIGKEIT VON OX
C
45    IF(OX.EQ.0) GOTO 80
C
C      EINLESEN VON SAUERSTOFFDATEN : H : HOEHE SAUERSTOFF UEBER OBERSTER
C                                REKONSTR. NI-KETTE [A]
C
      READ(1,*) H
      WRITE(3,99993) H
99993 FORMAT(1H0,"MIT SAUERSTOFFBEDECKUNG: HOEHE O UEBER NI [A] :",
+           F6.2)
      GOTO 90
80    WRITE(3,99990)
99990 FORMAT(1H0,"KEINE SAUERSTOFFBEDECKUNG")
C
C      WERTZUWEISUNGEN UND AUDRUCK FALLS TRACE=1
C
90    IF(TRACE.EQ.0) GOTO 92
      NINCX = NINCY = 1
      NSTOP = 500
      WRITE(3,99984)
99984 FORMAT(1H1,6X,*Y[A]*,6X,*Z[A]*,5X,*SY[A]*,5X,*SZ[A]*,
+           2X,*SCA[GRD]*,4X,*PUNITY*,4X,*PUNITZ*,
+           4X,*E[KEV]*,5X,*SEIND*,6X,*RIND*,4X,*NSTREU*,5X,
+           *ISTEP*,//)
C
C      BERECHNUNG VON GROESSEN, DIE IM GANZEN PROGRAMM UNVERAENDERT
C      GUELTIG BLEIBEN
C
92    UTH = UTERM*SQRT(T)
      UTH1Y = UTH*1.87
      UTH1Z = UTH*1.79
      UTH2Y = UTH*1.11
      UTH2Z = UTH*1.21
      NRDEP = INT(BETA*21.0)+1
      IF(NRDEP.GT.21) NRDEP = 21
      ALPHA1 = ALPHA*DPL
      ALPHA2 = (1.0-ALPHA)*DPL*DEPNORM(NRDEP)
C
C      SCHLEIFE UEBER NPHI EINSCHUSSWINKEL PHI
C
      DO11000 MPHI=1,NPHI
      XPHI = PHI(MPHI)
C
C      SCHLEIFE UEBER NTHETA EINSCHUSSWINKEL THETA
C
      DO11000 MTHETA=1,NTHETA

```

```

C      XTHETA = THETA(MTHETA)
C
C      BERECHNUNG VON STARTWERTEN
C
      DELTAZ = AZ*TAND(XPHI)/(COSD(XTHETA)*NINCX)
      IF(REKON.NE.0.0) DELTAZ = 2.0*DELTAZ
      DELTAY = AY/NINCY
      PSTRTY = SIND(XTHETA)*COSD(XPHI)
      PSTRTZ = -SIND(XPHI)
      IF(STEP.NE.0) DELSTPX = FLOAT(STPER1-SL2)/(NINCX+1)
C
C      INITIALISIERUNGEN : FLUX : FLUSSDICHEMATRIX
C                          PHIOUT : VERTEILUNG DER AUSTRITTSWINKEL
C                                  RUECKGESTREUTER TEILCHEN
C                          PHIION : VERTEILUNG DER AUSTRITTSWINKEL
C                                  RUECKGESTREUTER IONEN
C                          TGI : TARGETSTROM BEI VERSCHIEDENEN FREIEN
C                               WEGLAENGEN
C                          CRDPH : ENTSTEHUNGSTIEFERASTER FUER DIE
C                                  SEKUNDAERELEKTRONEN
C                          STOSTA : TIEFENAUFGELOESTES STOSSPARAMETER-
C                                  RASTER
C                          NEXSP : ABRUCH WEGEN ZU KLEINEM STOSSPARAMETER
C                          NEXDIR : ABRUCH WEGEN ZU GROSSER ABWEICHUNG AUS
C                                  DER NIEDERINDIZIERTEN RICHTUNG
C                          NEXNC : ABRUCH WEGEN UEBERSCHREITEN DER
C                                  VORGEgebenEN MAX. STOSSZAHL
C                          NEXEN : ABRUCH WEGEN ZU GERINGER ENERGIE
C                          NBACK : ZAHL RUECKGESTREUTER TEILCHEN
C                          BACKION : ZAHL RUECKGESTR. IONEN
C                          NEX : GESAMTZAHL DER ABGEBROCHENEN TEILCHEN
C                          NCOLEX : MITTLERE STOSSZAHL ABGEBROCHENER TEILCHEN
C                          NCOLBK : MITTLERE STOSSZAHL RUECKGESTREUTER
C                                  TEILCHEN
C                          ENBK : MITTLERE ENERGIE RUECKGESTREUTER TEILCHEN
C                          ENEX : MITTLERE ENERGIE DER ABGEBROCHENEN TEILCHEN
C                          ZEX : MITTLERE ABRUCHTIEFE
C
      DO110 J=1,11
      DO110 I=1,51
110    FLUX(I,J) = 0.0
C
      DO150 I=1,10
      TGI(I) = 0.0
      TGI1(I) = 0.0
      PHIION(I) = 0.0
150    PHIOUT(I) = 0.0
C
      DO152 I=1,30
152    CRDPH(I) = 0.0
C
      DO153 I=1,15
      DO153 J=1,20
153    STOSTA(I,J) = 0.0
C
      NEXSP=NEXDIR=NEXNC=NEXEN=NBACK=NEX=NCOLEX=NCOLBK= 0
      ENEX=ENBK=ZEX=BACKION = 0.0

```

```

C      TIME = SECOND(A)
C
C      SCHLEIFE UEBER DIE NINCX*NINCY EINGESCHOSSENEN TEILCHEN
C      ZUWEISUNG DER STARTKOORDINATEN :
C      MAN STARTET SO, DASS EINE EINHEITSZELLE AX*AY BZW. BEI RE-
C      KONSTRUKTION EINE EINHEITSZELLE (2*AX)*AY GLEICHMAESSIG
C      BESTRAHLT WIRD
C
C      DO 10200 MY=1,NINCY
C      YSTART = AY2 - (MY-0.5)*DELTAY
C      DO 10100 MX=1,NINCX
C      Y = YSTART
C      Z = ZSTART - (MX-0.5)*DELTAZ
C
C      STARTIMPULS, STARTENERGIE
C
C      PUNITY = PSTRTY
C      PUNITZ = PSTRTZ
C      E = E EIN
C
C      INITIALISIERUNG DES "STREUEBENENINDEX", "REKONSTRUKTIONSINDEX",
C      "STUFENZAEBHLERS" (AUCH BEI STEP=0), "STOSSZAEBHLERS"
C
C      SEIND = 1.0
C      RINDST = 1.0
C      ISTEP = 1
C      NCOL = 1
C
C      ZUSAETZLICHE INITIALISIERUNGEN BEI STUFEN
C      MAN VERTEILT DIE PROJEKILE GLEICHMAESSIG UEBER EINE
C      STUFENPERIODE
C
C      IF(STEP.EQ.0) GOTO 210
C      ISTEP = INT(MX*DELSTPX) + 1
C      NSTEP = SL1
160    IF(NSTEP.GE.ISTEP) GOTO 210
C      NSTEP = NSTEP + SL2
C      GOTO 160
C
C      SICHERHEITSSCHLEIFE, SORGT DAFUER, DASS PRO EINGESCHOSSENES
C      TEILCHEN MAXIMAL NSTOP STOEESSE GERECHNET WERDEN
C
210    DO10002 N=1,NSTOP
C
C
C      ZUFALLSGENERATOR ZUR BERUECKSICHTIGUNG THERMISCHER AUSLENKUNGEN
C      DER TARGETATOME : GAUSSVERTEILTE AUSLENKUNGEN MIT HALBWERTSBREITE 1
C      ERZEUGT NACH DER POLAREN METHODE
C
230    RAN1 = 2.0*RANF(0) - 1.0
C      RAN2 = 2.0*RANF(0) - 1.0
C      SQARSUM = RAN1*RAN1 + RAN2*RAN2
C      IF(SQARSUM.GE.1.0) GOTO 230
C      SQARSUM = SQRT(-2.0*ALOG(SQARSUM)/SQARSUM)
C      ELONG1 = RAN1*SQARSUM
C      ELONG2 = RAN2*SQARSUM

```

```

C   FORTZAEHLUNG DES REKONSTRUKTIONSINDEX
C
C   RIND = REKON*RINDST*0.5
C   IF(REKON.EQ.1.0) RIND=-AINT(SEIND+RINDST-1.5)
C
C   BERECHNUNG DES STOSSPARAMETERS ZUM NAECHSTLIEGENDEN NI-ATOM OHNE
C   BERUECKSICHTIGUNG THERMISCHER AUSLENKUNGEN AUS DEN PROJEKTIL-
C   KOORDINATEN (Y,Z)
C
C   YQUER = Y + AY2 - SEIND*AY2
C   SNIY = AMOD(YQUER,AY) - SIGN(AY2,YQUER)
C
C   FALLS Z<AZ*RIND :
C
C   IF(Z.GE.AZ*RIND) GOTO 1020
C   ZQUER = Z + SEIND*AZ2
C   SNIZ = AMOD(ZQUER,AZ) - SIGN(AZ2,ZQUER)
C   GOTO 1050
C
C   FALLS Z>AZ*RIND
C
C   1020 SNIZ = Z + AZ2 - SEIND*AZ2 - AZ*RIND
C
C   ERSTE ENTSCHEIDUNG, OB STOSS AN NICKEL ODER SAUERSTOFF :
C   SAUERSTOFF SCHEIDET AUS, WENN OX=0 (KEINE BEDECKUNG VORGEGEBEN)
C   ODER WENN RIND=0.0 (O NUR IN EBENEN MIT REKONSTR.)
C   ODER WENN Z<(REKON-1.0)*AZ2 (PROJEKTIL TIEF GENUG
C   UNTER DER OBERFLAECHEN)
C   ODER WENN BEI SAEGEZAHNREKONSTR. SEIND=0.0
C
C   1050 IF(OX.EQ.0.OR.RIND.EQ.0.0) GOTO 1080
C   IF(REKON.EQ.2.AND.SEIND.EQ.0.0.OR.Z.LT.(REKON-1.0)*AZ2)GOTO1080
C
C   WENN STOSS MIT SAUERSTOFF-ATOM NICHT AUSGESCHLOSSEN :
C   BERECHNUNG DES STOSSPARAMETERS ZUM NAECHSTGELEGENEN SAUERSTOFFATOM
C   OHNE BERUECKSICHTIGUNG THERMISCHER AUSLENKUNGEN AUS DEN PROJEKTIL-
C   KOORDINATEN (Y,Z)
C
C   YOX = Y + SEIND*AY2
C   SOXY = AMOD(YOX,AY) - SIGN(AY2,YOX)
C   SOXZ = Z - H - 0.5*REKON*AZ
C
C   ZWEITE ENTSCHEIDUNG, OB STOSS AN NICKEL ODER SAUERSTOFF ,
C   JE NACHDEM, WAS DEN GROESSEREN EINFLUSS BESITZT
C
C   IF((SNIY*SNIY+SNIZ*SNIZ).LT.(SOXY*SOXY+SOXZ*SOXZ)) GOTO 1080
C   NSTREU = 2
C   SY = SOXY + UTH1Y*ELONG1
C   SZ = SOXZ + UTH1Z*ELONG2
C   GOTO 1100
C   1080 NSTREU = 1
C
C   WENN DIE STREUUNG AN EINEM NI-ATOM DER OBERSTEN ATOMLAGE ERFOLGT :
C
C   IF((Z-REKAZ2*RIND).NE.SNIZ) GOTO 1085
C   SY = SNIY + UTH1Y*ELONG1
C   SZ = SNIZ + UTH1Z*ELONG2

```

```

GOTO 1100
C
C   WENN DIE STREUUNG AN EINEM NI-ATOM DER ZWEITEN ATOMLAGE ERFOLGT :
C
1085 IF((Z+AZ2-REKAZ2*RIND).NE.SNIZ) GOTO 1090
    SY = SNIY + UTH2Y*ELONG1
    SZ = SNIZ + UTH2Z*ELONG2
    GOTO 1100
C
C   WENN DIE STREUUNG AN EINEM SONSTIGEN NI-ATOM ERFOLGT
C
1090 SY = SNIY + UTH*ELONG1
    SZ = SNIZ + UTH*ELONG2
1100 CONTINUE
C
C   BERECHNUNG DES STREUWINKELS, DES NEUEN IMPULSES UND DER
C   AENDERUNG DER KOORDINATEN FUER DIE NAECHSTE STREUEBENE.
C   DABEI UEBERPRUEFUNG VON ABRUCHKRITERIEN
C
    S = SQRT(SY*SY + SZ*SZ)
    SATF = S*ATFINV(NSTREU)
C
C   ABRUCH WEGEN ZU KLEINEM STOSSPARAMETER
C
    IF(SATF.LT.1.0E-3) GOTO 10015
    SINV = 1.0/S
    IF(SATF.GE.1.5) GOTO 1210
    SCATANG = 1.01*CONST(NSTREU)*EXP(-0.5*SATF)/(SATF*E)
    GOTO 1250
1210 SCATANG = CONST(NSTREU)*(0.03*ABS(SATF-3.8)+0.64)
    +      *EXP(-0.3*SATF)/(SATF*E)
C
C   AUSDRUCK FALLS TRACE=1
C
1250 IF(TRACE.EQ.0) GOTO 1255
    SCADEG = SCATANG*RADINV
    WRITE(3,99983) Y,Z,SY,SZ,SCADEG,PUNITY,PUNITZ,E,
    +      SEIND,RIND,NSTREU,ISTEP
99983 FORMAT(1H ,4F10.2,4F10.3,2F10.1,2I10)
1255 PUNITY = PUNITY + SCATANG*SINV*SY
    PUNITZ = PUNITZ + SCATANG*SINV*SZ
    DY = DPL*PUNITY
    DZ = DPL*PUNITZ
C
C   BERECHNUNG DES ENERGIEVERLUSTS JE NACH THEORIE
C   IN DIESER VERSION : KEIN ENERGIEVERLUST AN SAUERSTOFF
C
    IDE = INT(E*0.2 + 0.5)
    DERAN = ZIEGLER(IDE)
    IF(NSTREU.EQ.2) DERAN = 0.0
    DEIND = DERAN*ALPHA1
    DEDEP = DERAN*ALPHA2*EXP(-BETA*SATF)
    E = E - DEDEP
    IF(Z.LT.REKGAM) E = E - DEIND
C
C   ABRUCH WEGEN ZU GROSSER ABWEICHUNG VON DER NIEDERIND. RICHTUNG
C

```

```

IF(PUNITY*PUNITY+PUNITZ*PUNITZ.GT.TAN25SQ) GOTO 10025
C
C   ABBRUCH WEGEN ZU GERINGER ENERGIE
C
IF(E.LE.2.5) GOTO 10030
C
C   BERECHNUNG DES TARGETSTROMS (JE NACH THEORIE) UND
C   EXPONENTIALGEWICHTUNG MIT FREIEN WEGLAENGEN FUER ELEKTRONEN
C
DTGI = DEDEP
IF(Z.LT.REKGAM) DTGI = DTGI + DEIND
ZESC = Z - REKAZ2
DO1500 K=1,NRFPL
  ESCPROB = 1.0
  IF(ZESC.GT.0.0) GOTO 1500
  ESCPROB = 0.0
  ZFPL = ZESC*FPLINV(K)
  IF(ZFPL.LT.-15.0) GOTO 1500
  ESCPROB = EXP(ZFPL)
1500  TGI(K) = TGI(K) + DTGI*ESCPROB
C
C   AUSWERTUNG DER NEUEN DATEN
C
Y1 = Y + AY2
Y2 = AY2 - AMOD(Y1,AY) + SIGN(AY2,Y1)
J = INT(Y2*AYINV11) + 1
IF(J.GT.11) J=11
Z2 = 2.0*AZ - Z
IF(Z2.LT.0.0) GOTO 4010
I = INT(Z2*AZINV10 + 0.5) + 1
IF(I.GT.51) GOTO 4010
FLUX(I,J) = FLUX(I,J) + 1.0
4010  CONTINUE
Z3 = 4.5*AZ2 - Z
K1 = INT(Z3*AZINV2) + 1
IF(K1.GT.30.OR.Z3.LT.0.0) GOTO 4020
CRDPATH(K1) = CRDPATH(K1) + DTGI
K2 = INT(S*10.0) + 1
IF(K2.GT.20.OR.K1.GT.15) GOTO 4020
STOSTA(K1,K2) = STOSTA(K1,K2) + 1.0
4020  CONTINUE
C
C   BESTIMMUNG RESTLICHER DATEN FUER EINEN FOLGENDEN STOSS IN DER
C   NAECHSTEN STREUEBENE
C
NCOL = NCOL + 1
Y = Y + DY
Z = Z + DZ
C
C   ABBRUCH WEGEN WIEDERERREICHEN DER STARTHOEHE (RUECKSTREUUNG);
C   DIE ZUSAEZTLICHE FORDERUNG PUNITZ>0 IST NOETIG, DA BEI STUFEN
C   ZSTART WIEDERERREICHT WERDEN KANN, OBWOHL DAS PROJEKTIL NOCH GAR
C   NICHT ZUR KRISTALLOBERFLAECHTE GELANGT IST
C
IF(Z.GT.ZSTART.AND.PUNITZ.GT.0.0) GOTO 10094
SEIND = -AINT(SEIND - 1.5)
IF(SEIND.EQ.1.0) ISTEP = ISTEP + 1

```

```

C      IF(SEIND.EQ.0.0) RINDST = -AINT(RINDST-1.5)
C
C      BERUECKSICHTIGUNG VON STUFEN
C
      IF(STEP.EQ.0) GOTO 10002
      IF(ISTEP.LE.NSTEP.OR.SEIND.EQ.1.0) GOTO 10002
      Y = Y + AY2
      Z = Z - STDIR*ISIGN(1,STPER2-ISTEP)
      SEIND = 1.0
      RINDST = 1.0
      NSTEP = NSTEP + SL2
      IF(NSTEP.LT.STPER1) GOTO 10002
      ISTEP = 1
      NSTEP = SL1
C
C      ENDE DER SICHERHEITSSCHLEIFE UEBER DIE MAXIMALE STOSSZAHL/TEILCHEN
C
10002 CONTINUE
C
C      SPEICHERUNG DER ABRUCHURSACHE
C
      NEXNC = NEXNC + 1
      GOTO 10090
10015 NEXSP = NEXSP + 1
      GOTO 10090
10025 NEXDIR = NEXDIR + 1
      GOTO 10090
10030 NEXEN = NEXEN + 1
C
C      BERUECKSICHTIGUNG DER ELEKTRONENPRODUKTION NACH ABRUCH DER
C      TRAJEKTORIE; ANGENOMMEN: GRADLINIGE RANDOMBAHN
C
10090 ZESC = Z - REKAZ2
      IF(ZESC.GE.0.0.OR.E.LE.0.0) GOTO 10092
      PZEX = PUNITZ
      IF(ABS(PUNITZ).LT.0.25) PZEX = SIGN(0.25,PUNITZ)
      ZPR = -PZEX*FAKTOR*(E**EXPON)
      ZPRINV = 1.0/ZPR
      ZPR1 = ZPR
      IF(ZPR.LE.ZESC) ZPR1 = ZESC
      DO10091 J=1,NRFPL
      ZFPL = ZESC*FPLINV(J)
      ZFPL1 = (ZESC - ZPR1)*FPLINV(J)
      SUMME1 = SUMME2 = 0.0
      IF(ZFPL1.GT.-15.)SUMME1=EXP(ZFPL1)*(1.-(FPL(J)+ZPR1)*ZPRINV)
      IF(ZPR.GT.-15.0) SUMME2 = EXP(ZFPL)*(1.0 - FPL(J)*ZPRINV)
10091 TGI1(J)=TGI1(J)+FPL(J)*DERAN*(SUMME1-SUMME2)/PZEX
10092 ZEX = ZEX + Z
      ENEX = ENEX + E
      NEX = NEX + 1
      NCOLEX = NCOLEX + NCOL
      GOTO 10100
C
C      DATEN IM FALL EINER RUECKSTREUUNG
C
10094 NBACK = NBACK + 1
      NCOLBK = NCOLBK + NCOL

```

```

ENBK = ENBK + E
C
C   BERUECKSICHTIGUNG DER NEUTRALISATION
C   VON HE ENTSPRECHEND GRASER,LIST
C
  AXX1 = 0.6*(E*0.01)**1.5
  BACKION = BACKION + AXX1/(1.0+AXX1)
10096 IOUT = INT(PUNITZ*RADINV*2.0) + 1
      IF(IOUT.GT.10) GOTO 10100
      PHIOUT(IOUT) = PHIOUT(IOUT) + 1.0
      PHIION(IOUT) = PHIION(IOUT) + AXX1/(1.0+AXX1)
C
C   ENDE DER SCHEIFEN UEBER DIE ZAHL EINGESCHOSSENER TEILCHEN
C
10100 CONTINUE
10200 CONTINUE
C
C   AUFBEREITUNG, NORMIERUNG UND AUSDRUCK DER ERGEBNISSE
C
  TIME = SECOND(A) - TIME
  PNORM = 1.0/NINC
  FLXNORM = 50.0*SIND(XPHI)*PNORM
  IF(NEX.EQ.0) GOTO 10250
  NCOLEX = NCOLEX/NEX
  ENEX = ENEX/NEX
  ZEX = ZEX/NEX
10250 IF(NBACK.EQ.0) GOTO 10260
      NCOLBK = NCOLBK/NBACK
      ENBK = ENBK/NBACK
10260 CONTINUE
      DO10310 I=1,51
      DO10310 J=1,11
10310 FLUX(I,J) = FLUX(I,J)*FLXNORM
      DO10320 I=1,10
      TGI(I) = TGI(I)*PNORM
      TGI1(I) = TGI1(I)*PNORM
      TGI1(I) = TGI1(I) + TGI(I)
      PHIION(I) = PHIION(I)*PNORM
10320 PHIOUT(I) = PHIOUT(I)*PNORM
      DO10340 I=1,30
10340 CRDPTH(I) = CRDPTH(I)*PNORM
      DO10402 I=1,15
      STONORM = 0.0
      DO10400 J=1,20
10400 STONORM = STONORM + STOSTA(I,J)
      IF(STONORM.EQ.0.0) GOTO 10402
      STOINV = 1.0/STONORM
      DO10401 J=1,20
10401 STOSTA(I,J) = STOSTA(I,J)*STOINV
10402 CONTINUE
      WRITE(3,99989) XTHETA,XPHI,NEX,NEXSP,NEXDIR,NEXNC,NEXEN
      WRITE(3,99988) ENEX,ZEX,NCOLEX
      WRITE(3,99987) NBACK,BACKION,ENBK,NCOLBK,PHIOUT,PHIION
      WRITE(3,99980) CRDPTH
      WRITE(3,99985) (FPL(I),I=1,NRFPL)
      WRITE(3,99982) (TGI(I),I=1,NRFPL)
      WRITE(3,99981) (TGI1(I),I=1,NRFPL)

```

```

WRITE(3,99971)((STOSTA(I,J),J=1,20),I=1,15)
WRITE(3,99979) TIME
WRITE(3,99986) ((FLUX(I,J),J=1,11),I=1,51)
99989 FORMAT(1H1,120(1H=),/,1H0,*ERGEBNISSE :*,29X,*THETA :*,F8.2,
+ 20X,*PHI :*,F8.2,/,1H0,120(1H=),/,
+ 1H0,*GESAMTZAHL ABGEBROCHENER TEILCHEN :*,15X,I6,/,
+ 1H ,*DAVON WEGEN ZU KLEINEM STOSSPARAMETER :*,11X,I6,/,
+ 1H ,12X,*ABWEICHUNG AUS DER NIEDERIND. RICHT. :*,I6,/,
+ 1H ,12X,*UEBERSCHREITEN DER MAX.STOSSZAHL :*,4X,I6,/,
+ 1H ,12X,*ZU GERINGER ENERGIE :*,17X,I6)
99988 FORMAT(1H0,*MITTLERE ABRUCHENERGIE [KEV] :*,15X,F10.3,/,
+ 1H ,*MITTLERE ABRUCHTIEFE [A] :*,21X,F8.2,/,
+ 1H ,*MITTLERE STOSSZAHL ABGEBROCHENER TEILCHEN :*,
+ 7X,I6)
99987 FORMAT(1H0,*GESAMTZAHL RUECKGESTREUTER TEILCHEN :*,21X,I6,/,
+ 1H ,*GESAMTZAHL RUECKGESTREUTER IONEN :*,21X,F6.1,/,
+ 1H ,*MITTLERE ENERGIE RUECKGESTREUTER TEILCHEN [KEV] :*,
+ 5X,F10.3,/,
+ 1H ,*MITTLERE STOSSZAHL RUECKGESTREUTER TEILCHEN :*,
+ 13X,I6,/,
+ 1H0,*WINKELVERTEILUNG DER RUECKGESTREUTEN *,
+ *TEILCHEN :*,/,1H0,*WINKELINTERVALL [GRAD]:*,
+ 2X,* 0-0.5*,* 0.5-1.0*,* 1.0-1.5*,* 1.5-2.0*,
+ * 2.0-2.5*,* 2.5-3.0*,* 3.0-3.5*,* 3.5-4.0*,
+ * 4.0-4.5*,* 4.5-5.0*,/,1H ,*RUECKGESTR.TEILCHEN/ION :*,
+ 10F9.2,/,1H ,*RUECKGESTR.IONEN/ION :*,10F9.2)
99986 FORMAT(1H1,*FLUSSDICHTEMATRIX, NORMIERT AUF DIE FLUSSDICHTEN DER*
+ * EINFALLENDEN TEILCHEN :*,///,51(/,1H0,11F5.1))
99985 FORMAT(1H0,*FREIE WEGLAENGE [A] :*,10F9.2)
99982 FORMAT(1H ,*TARGETSTROM :*,8X,10F9.2)
99981 FORMAT(1H ,*MIT ABGEBR. BEITRAG :*,10F9.2)
99980 FORMAT(1H0,*ENTSTEHUNGSTIEFE DER SEKUNDAERELEKTRONEN :*,/,
+ 1H0,*NR.DER LAGE :*,8X,*1*,8X,*2*,8X,*3*,8X,*4*,8X,
+ *5*,8X,*6*,8X,*7*,8X,*8*,8X,*9*,7X,*10*,/,1H ,
+ *ELEKTRONEN/ION:*,10F9.2,/,1H0,*NR.DER LAGE :*,7X,*11*,7X,
+ *12*,7X,*13*,7X,*14*,7X,*15*,7X,*16*,7X,*17*,7X,*18*,7X,
+ *19*,7X,*20*,/,1H ,*ELEKTRONEN/ION:*,10F9.2,/,1H0,
+ *NR.DER LAGE :*,7X,*21*,7X,*22*,7X,*23*,7X,*24*,7X,*25*,
+ 7X,*26*,7X,*27*,7X,*28*,7X,*29*,7X,*30*,/,1H ,
+ *ELEKTRONEN/ION:*,10F9.2)
99971 FORMAT(1H0,*TIEFENAUFGELOESTES STOSSPARAMETERRASTER :*,/,
+ 1H ,*DIE ZEILEN DER FOLGENDEN MATRIX ENTSPRECHEN DEN *,
+ *ATOMLAGEN WIE IN > ENTSTEHUNGSTIEFE <*,/,
+ 1H ,*DIE SPALTEN ENTSPRECHEN EINEM RASTER VON 0.1A BREITE ,*,
+ * NORMIERUNG : ZEILENSUMME = 1*,/,
+ 15(/,1H ,20F6.2))
99979 FORMAT(1H0,*WESENTLICHE RECHENZEIT [S] :*,18X,F10.4)
C
C ENDE DER SCHLEIFE UEBER DIE EINSCHUSSWINKEL
C
11000 CONTINUE
STOP
END

```

Literatur

- 01 E.S.Mashkova,V.A.Molchanov,Sov.Phys.Tech.Phys.10 (1965) 449
- 02 U.v.Gemmingen, Surf.Sci. 120 (1982) 334
- 03 G.Holmen,P.Högberg, Rad.Eff. 12 (1972) 77
- 04 C.Argile,M.G.Barthes-Labrousse,G.E.Rhead, Surf.Sci. 138 (1984) 181
- 05 C.Argile,G.E.Rhead, J.Phys.C:Solid State Phys.30 (1982) L193
- 06 G.Ertl,J.Küppers, Low Energy Electrons and Surface Chemistry (Verlag Chemie,Weinheim,1974)
- 07 W.Paul,H.P.Reinhard,U.v.Zahn, Z.Phys. 152 (1958) 143
- 08 U.v.Gemmingen, Dissertation,Universität München,1980
- 09 H.Schnitzer, Praktikumsarbeit,Universität München,1979
- 10 G.Petzow, Metallogr. Ätzen, Materialkundl.Techn.Reihe 1, (Verlag Borntraeger,Berlin,1976) S.11
- 11 W.Graser,C.Varelas, Surf.Sci. 157 (1985) 74
- 12 H.Winter, Diplomarbeit,Universität München,1982
- 13 K.Wandelt, Dissertation,Universität München,1975
- 14 L.McDonnell,B.D.Powell,D.P.Woodruff, Surf.Sci.40 (1973) 669
- 15 P.C.Zalm,L.J.Beckers, Surf.Sci. 152/153 (1985) 135
- 16 E.Veje, Nucl.Instr.Meth. 194 (1982) 433
- 17 M.G.Barthes-Labrousse,G.E.Rhead, Surf.Sci. 116 (1982) 217
- 18 C.List, Diplomarbeit,Universität München,1985
- 19 M.Schuster, Diplomarbeit,Universität München,1981
- 20 L.P.Erasmus, Diplomarbeit,Universität München,1982
- 21 W.Graser, Dissertation,Universität München,1983
- 22 M.Schuster, Dissertation,Universität München,1985
- 23 J.Bohdansky,G.L.Chen,W.Eckstein,J.Roth,B.M.U.Scherzer, R.Behrish, J.Nucl.Mat. 111/112 (1982) 717
- 24 D.Hasselkamp,K.G.Lang,A.Scharmann,N.Stiller, Nucl.Instr.Meth. 180 (1981) 349
- 25 B.Svensson,G.Holmen,A.Buren, Phys.Rev.B 24,7 (1981) 3749
- 26 D.Hasselkamp,A.Scharmann, Phys.Lett. 96A,5 (1983) 259
- 27 R.Sizmann,C.Varelas, Nucl.Instr.Meth. 132 (1976) 633
- 28 C.Varelas, Habilitationsschrift,Universität München,1979

- 29 D.S.Gemmell, Rev.Mod.Phys. 46,1 (1974) 129
- 30 G.Molière, Z.Naturforsch. 2a (1947) 133
- 31 J.Lindhard,V.Nielsen,M.Scharff,Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 36,10 (1968)
- 32 J.Lindhard, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 34,14 (1965)
- 33 R.Sizmann,C.Varelas, Festkörperprobleme XVII (1977) 261
- 34 C.Varelas,R.Sizmann, Rad.Eff. 16 (1972) 211
- 35 U.Bill,R.Sizmann,C.Varelas,K.E.Rehm, Rad.Eff. 27 (1975) 59
- 36 V.I.Shulga, Rad.Eff. 26 (1975) 61
- 37 S.D.Mukherjee,M.W.Thompson, Rad.Eff. 55 (1981) 223
- 38 Y.Yamamura,W.Takeuchi, Rad.Eff. 49 (1980) 251
- 39 M.Schuster,C.Varelas, Surf.Sci. 134 (1983) 195
- 40 E.Sailer,C.Varelas, Nucl.Instr.Meth. B2 (1984) 326
- 41 D.V.Morgan,D.van Vliet, Can.J.Phys. 46 (1968) 503
- 42 J.H.Barrett, Phys.Rev.B 3,5 (1971) 1527
- 43 K.Günther, Diplomarbeit,Universität München,1977
- 44 H.D.Carstanjen, Dissertation,Universität München,1973
- 45 C.Varelas,R.Sizmann, Rad.Eff. 25 (1975) 163
- 46 M.Abramowitz,I.A.Segun, Handbook of Math. Functions (Dover Publ.,New York,1968)
- 47 L.D.Landau,E.M.Lifschitz, Lehrbuch der theoret. Phys., Bd.1,Mechanik (Vieweg Verlag,Braunschweig,1970) S.58
- 48 M.Hou,C.Varelas, Appl.Phys.A 33 (1984) 121
- 49 J.F.Ziegler, The Stopping and Ranges of Ions in Matter, (Pergamon Press,New York,1977), Bd.3 (Wasserstoff), zusammen mit H.H.Andersen, Bd.4 (Helium)
- 50 P.Sigmund, in:Radiation Damage Processes in Materials, Ed.:C.M.S.Dupuy, NATO Advanced Study Institutes Series, Series E: Appl.Sci.8,Noordhoff-Leyden,1975
- 51 L.D.Landau,E.M.Lifschitz, Lehrbuch der theoret.Phys.,Bd.5, Statistische Physik I (Akademie Verl.,Berlin,1979) S.82
- 52 C.Kittel, Einführung in die Festkörperphysik (Oldenburg Verlag,München,1973) S.157
- 53 R.J.Glauber, Phys.Rev. 98 (1955) 1692
- 54 D.P.Jackson, Surf.Sci. 43 (1974) 431
- 55 R.H.Wilson,E.F.Skelton,J.L.Katz, Acta Cryst. 21 (1966) 635

- 56 D.E.Knuth, The Art of Computer Programming, Bd.2
(Addison Wesley, 1969) S.104
- 57 G.Rovida, M.Torrini, E.Zanazzi, Chem.Phys.Lett. 3 (1969) 201
- 58 R.Pfandzelter, Diplomarbeit, Universität München, 1985
- 59 G.Carter, J.S.Colligon, Ion Bombardment of Solids
(Heinemann Educational Books, London, 1968) S.38ff.
- 60 H.D.Hagstrum, Phys.Rev. 96 (1954) 336
- 61 R.A.Baragiola, E.V.Alonso, J.Ferron, A.Oliva-Florio,
Surf.Sci. 90 (1979) 240
- 62 E.V.Alonso, R.A.Baragiola, J.Ferron, M.M.Jakas, A.Oliva-Florio,
Phys.Rev.B 22,1 (1980) 80
- 63 H.Oechsner, Phys.Rev.B 17,3 (1978) 1052
- 64 L.M.Kishinevski, Rad.Eff. 19 (1973) 23
- 65 P.Sigmund, S.Tougaard, in: Inelastic Particle-Surface
Collisions, Ed.: E.Taglauer, W.Heiland, Springer Series in
Chem. Phys. 17, Springer-Verlag, 1981
- 66 J.Lindhard, V.Nielsen, M.Scharff, P.V.Thomsen,
Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 33,10 (1963)
- 67 R.Bindi, H.Lanteri, P.Rostaing, J.Phys.D:Appl.Phys.
13 (1980) 267
- 68 J.Schou, Phys.Rev.B 22,5 (1980) 2141
- 69 G.Holmen, B.Svensson, J.Schou, P.Sigmund, Phys.Rev.B
20,6 (1979) 2247
- 70 R.A.Baragiola, E.V.Alonso, A.Oliva-Florio, Phys.Rev.B
19,1 (1979) 121
- 71 E.J.Sternglass, Phys.Rev. 108,1 (1957) 1
- 72 R.J.Beuhler, L.Friedman, J.Appl.Phys. 48,9 (1977) 3928
- 73 E.S.Parilis, L.M.Kishinevski, Sov.Phys.-Sol.State
3,4 (1960) 885
- 74 J.M.Hansteen, O.M.Johnsen, L.Kocbach, Atomic Data and Nucl.
Data Tables 15 (1975) 305
- 75 D.K.Brice, P.Sigmund, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk. 40,8 (1980)
- 76 O.S.Oen, M.T.Robinson, Nucl.Instr.Meth. 132 (1976) 647
- 77 J.Lindhard, A.Winther, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.
34,4 (1964)
- 78 I.Gertner, M.Meron, B.Rosner, Phys.Rev.A 18,5 (1978) 2022
- 79 I.Gertner, M.Meron, B.Rosner, Phys.Rev.A 21,4 (1980) 1191

- 80 W.Brandt, in:Atomic Collisions in Solids,Bd.1, Ed.:S.Datz,
B.R.Appleton,C.D.Moak,Plenum Press,New York,1975
- 81 C.O.Almbladh,U.v.Barth,Z.D.Popovic,M.J.Stott,
Phys.Rev.B 14,6 (1976) 2250
- 82 E.Zaremba,L.M.Sander,H.B.Shore,J.H.Rose, J.Phys.F:
Metal Phys. 7,9 (1977) 1763
- 83 F.J.Himpsel,J.A.Knapp,D.E.Eastman, Phys.Rev.B
19,6 (1979) 2919
- 84 E.Marschall,H.Bross, phys.stat.sol.(b) 90 (1978) 241
- 85 C.S.Wang,A.J.Freeman, J.Appl.Phys. 50,3 (1979) 1940
- 86 C.S.Wang,A.J.Freeman, Phys.Rev.B 21,10 (1980) 4585
- 87 F.J.Arlinghaus,J.G.Gay,J.R.Smith, Phys.Rev.B 21,6(1980)2055
- 88 F.Herman,S.Skillman, Atomic Structure Calculations,
Englewood (New Jersey)
- 89 Bergmann-Schäfer, Lehrbuch der Experimentalphysik,
Bd.IV,1, (de Gruyter,Berlin,1981) S.87
- 90 J.F.Ziegler, The Stopping and Ranges of Ions in Matter,
Bd.1 (Stopping and Range of Ions in Solids)
zusammen mit J.P.Biersack und U.Littmark,
(Pergamon Press,New York,1985)
- 91 C.S.Wang,A.J.Freeman, Phys.Rev.B 19,2 (1979) 793
- 92-95 entfallen
- 96 W.A.Coghlan,R.E.Clausing, Atomic Data 5 (1973) 317
- 97 D.P.Woodruff, in:The Chemical Physics of Solid Surfaces and
Heterogeneous Catalysis, Ed.:D.A.King,D.P.Woodruff
(Elsevier,Amsterdam,1981) S.101
- 98 A.S.Dawydow, Quantenmechanik (Deutscher Verlag der Wissen-
schaften,Berlin,1978) S.389
- 99 P.A.Wolff,Phys.Rev 95,1 (1954) 56
- 100 I.N.Bronstein,K.A.Semendjajew, Taschenbuch der Mathematik
(Verl.Harri Deutsch,Frankfurt/M.,1980)
- 101 M.Negre,J.Mischler,N.Benazeth,C.Noguerra,D.Spanjaard,
Surf.Sci. 78 (1978) 174
- 102 N.Colombie,C.Benazeth,J.Mischler,L.Viel, Rad.Eff.
18 (1973) 251
- 103 J.Mischler,M.Negre,N.Benazeth, Rad.Eff. 70 (1983) 117
- 104 J.F.Ziegler,G.J.Iafrate, Rad.Eff. 46 (1980) 199

- 105 W.Graser,C.Varelas, *Physica Scripta* T6 (1983) 153
- 106 L.M.Kishinevski,E.S.Parilis, *Bull.Acad.Sci.(USSR) Phys.Ser.*
26 (1963) 1432
- 107 M.Schuster,C.Varelas, *Nucl.Instr.Meth.* B9 (1985) 145
- 108 W.Zollitsch, *Diplomarbeit, Universität München*, 1986
- 109 B.Svensson,G.Holmen, *J.Appl.Phys.* 52,11 (1981) 6928
- 110 L.H.Germer,A.U.MacRae, *J.Appl.Phys.* 33 (1962) 2923
- 111 W.Heiland,E.Taglauer, *J.Vac.Sci.Techn.* 9 (1972) 620
- 112 P.M.Marcus,J.E.Demuth,D.W.Jepsen, *Surf.Sci.* 53 (1975) 501
- 113 L.K.Verheij,J.A.Van den Berg,D.G.Armour, *Surf.Sci.*
84 (1979) 408
- 114 S.Masuda,M.Nishijima,Y.Sakisaka,M.Onchi, *Phys.Rev.B*
25,2 (1982) 863
- 115 J.A.Van den Berg,L.K.Verheij,D.G.Armour, *Surf.Sci.*
91 (1980) 218
- 116 R.G.Smeenk,R.M.Tromp,F.W.Saris, *Surf.Sci.* 107 (1981) 429
- 117 A.M.Baro,G.Binning,H.Rohrer,Ch.Gerber,E.Stoll,A.Baratoff,
F.Salvan, *Phys.Rev.Lett.* 52 (1984) 299
- 118 K.Baberschke,U.Döbler,L.Wenzel,D.Arvanitis,A.Baratoff,
K.H.Rieder, *Phys.Rev.B* 33,8 (1986) 5910
- 119 H.Niehus,G.Comsa, *Surf.Sci.* 151 (1985) L171
- 120 D.Menzel,J.C.Fuggle, *Surf.Sci.* 74 (1978) 321
- 121 C.Benndorf,B.Egert,C.Nöbl,H.Seidel,F.Thieme, *Surf.Sci.*
92 (1980) 636
- 122 R.G.Smeenk,R.M.Tromp,J.F.Van der Veen,F.W.Saris,
Surf.Sci. 95 (1980) 156
- 123 K.H.Rieder, *Phys.Rev.B* 27,11 (1983) 6978
- 124 P.H.Holloway, *J.Vac.Sci.Techn.* 18,2 (1981) 653
- 125 H.H.Brongersma,J.B.Theeten, *Surf.Sci.* 54 (1976) 519
- 126 S.Y.Tong,K.H.Lau, *Phys.Rev.B* 25,12 (1982) 7382
- 127 R.G.Smeenk,R.M.Tromp,J.W.M.Frenken,F.W.Saris,
Surf.Sci. 112 (1981) 261
- 128 P.H.Holloway,J.B.Hudson, *Surf.Sci.* 43 (1974) 123
- 129 V.Schomaker,D.P.Stevenson, *J.Am.Chem.Soc.* 63 (1941) 37

- 130 J.Hölzl, F.K.Schulte, in: Solid Surface Physics, Ed.:
G.Höhler, Springer Tracts in Mod.Phys.85 (Springer-
Verlag, Berlin, 1979) S.91
- 131 H.D.Hagstrum, G.E.Becker, J.Chem.Phys. 54,3 (1971) 1015
- 132 C.A.Papageorgopoulos, J.M.Chen, Surf.Sci. 52 (1975) 40
- 133 D.Hasselkamp, A.Scharmann, N.Stiller, Nucl.Instr.Meth.
168 (1980) 579
- 134 J.Ferron, E.V.Alonso, R.A.Baragiola, A.Oliva-Florio,
Surf.Sci. 120 (1982) 427
- 135 J.W.May, L.H.Germer, Surf.Sci. 11 (1968) 443

Dank

Zum Abschluß der Arbeit gilt mein aufrichtiger Dank :

Herrn Prof. Dr. R. Sizmann für die Arbeitsmöglichkeit an seinem Lehrstuhl.

Herrn Dr. habil. C. Varelas für die Themenstellung, die tatkräftige Unterstützung bei allen anstehenden Problemen und für die Diskussion der Ergebnisse; besonders zu danken ist Ihm für die Fortsetzung der Betreuung auch nach seinem Verlassen der Universität auf Kosten seiner knapp bemessenen freien Zeit.

Herrn Prof. Dr. W. Soszka aus Krakau, Herrn Dr. M. Schuster und Herrn Dipl.Phys. E. Sailer für ihre Diskussionsbereitschaft, ihre Ratschläge und Hilfe auch in Angelegenheiten von Versuchsaufbau und -durchführung.

Herrn Ebenböck und seinen Mitarbeitern der Institutswerkstatt.

Frau D. Hegenberg, Herrn W. Stadler, Herrn H. Bradatsch sowie allen Angehörigen des Lehrstuhls für die gute Zusammenarbeit.

Diese Arbeit wurde ermöglicht durch Mittel des Sonderforschungsbereichs 128 der Deutschen Forschungsgemeinschaft. Mein Dank dafür gilt den verantwortlichen Herren, insbesondere Herrn Prof. Dr. G. Ertl.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Geburt: 18. September 1957 in Münchberg
Eltern: Hans Winter, Sparkassenangestellter i.R.
Mali Winter, Hausfrau

Schulbildung

1963-1967 Volksschule Traunreut
1967-1976 Neusprachliches Gymnasium Traunreut
25.6.1976 Abitur

Wehrdienst

Juli 1976-Sept. 1977 Grundwehrdienst

Studium

Nov. 1977-März 1983 Studium der Physik an der Ludwig-
Maximilians-Universität München
Nov. 1981-Dez. 1982 Diplomarbeit am Lehrstuhl von
Prof. Dr. R. Sizmann mit dem Thema :
"Streuverteilung und optische Anregung
bei Ionen-Oberflächen-Streuung"
15.3.1983 Diplom

Beruf

seit dem 1.4.1983 wissenschaftlicher Angestellter der
Sektion Physik der Universität München,
Lehrstuhl Prof. Dr. R. Sizmann;
Anfertigung der Dissertation

